



Relatório de Atividades

2002

Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos
Departamento de Física e Informática

Introdução

O Departamento de Física e Informática – FFI, assim como o IFSC de maneira global, está organizado em Grupos de Pesquisa que nucleiam 33 docentes que desenvolvem 91 linhas de pesquisa, compartilhando laboratórios, apoio técnico e administrativo. Os grupos de pesquisa do FFI são:

1. Grupo de Biofísica Molecular e Espectroscopia (4 docentes);
2. Grupo de Cristalografia (6 docentes);
3. Grupo de Espectroscopia de Sólidos (2 docentes);
4. Grupo de Física Teórica (8 docentes);
5. Grupo de Filmes Finos (1 docente);
6. Grupo de Instrumentação e Informática (5 docentes); e,
7. Grupo de Ressonância Magnética (7 docentes);

As atividades desenvolvidas por esses Grupos de Pesquisa no decorrer de 2002 são abordadas neste relatório de acordo com o roteiro elaborado pela Chefia do FFI. O roteiro completo contém vários tópicos, os quais foram preenchidos pelo Coordenador de cada Grupo de Pesquisa.

Como indicadores globais do Departamento pode-se destacar que: **123** trabalhos foram publicados em periódicos internacionais indexados (média do Fator de Impacto **2.052**); **33** pós-doutorandos desenvolveram projetos de pesquisa junto ao FFI, incluindo Jovens Pesquisadores da FAPESP; formaram-se **08** doutores e **19** mestres orientados por docentes do FFI, no período; **73** doutorandos e **28** mestrandos estão desenvolvendo seus programas de pós-graduação neste Departamento. Esta atividade tem sido possível em face do constante apoio de agências de fomento nacionais e internacionais, através dos **113** projetos de pesquisa em andamento no FFI. Devido aos diversos projetos em andamento **40** alunos de iniciação científica estão tendo a oportunidade de aprender e iniciar a realização de projetos científicos.

Como parte integrante de nossa instituição temos a honra de contar com a colaboração de **06** docentes aposentados, que mantêm suas atividades acadêmicas de pesquisa, orientação e docência.

Os dois departamentos do Instituto de Física de São Carlos, Departamento de Física e Informática e Departamento de Física e Ciência dos Materiais, têm trabalhado sempre de forma integrada e harmônica, com critérios de qualidade e avaliação interna similares, o que tem garantido ao IFSC singular posição no cenário da Física brasileira e internacional.

Como indicativo deste desempenho, o programa de pós-graduação do IFSC tem nota máxima na avaliação da CAPES (nota 7,0) e sedia atualmente 02 Centros FAPESP de Pesquisa, Inovação e Difusão e 01 Instituto do Milênio do CPNq.

A seguir apresentam-se de forma gráfica a estatísticas diversas relacionadas aos Recursos Humanos, Financeiros, Produtividade Acadêmica e Científica do Departamento de Física e Informática.

Prof. Dr. Glaucius Oliva

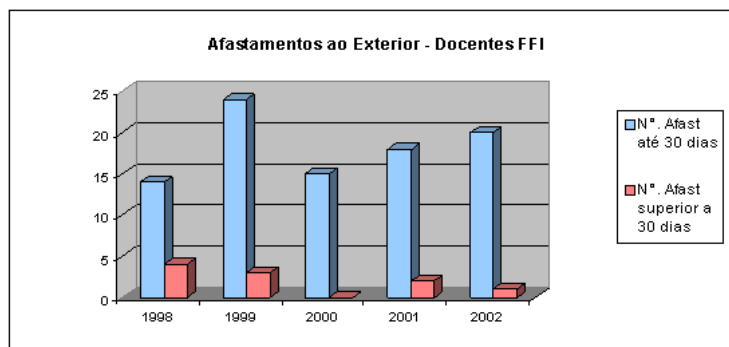
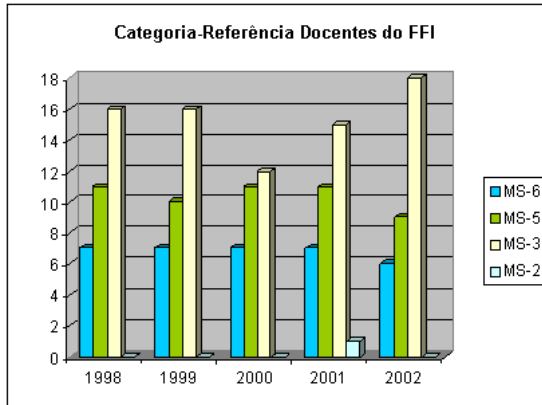
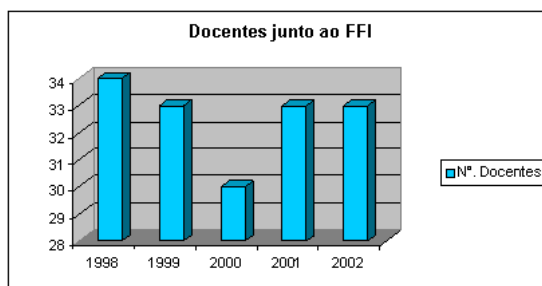
Chefe do Departamento de Física e Informática - Mandato (27/03/2002 a 26/03/2004)

Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes

Vice-Chefe do Departamento de Física e Informática - Mandato (08/05/2002 a 07/05/2004)

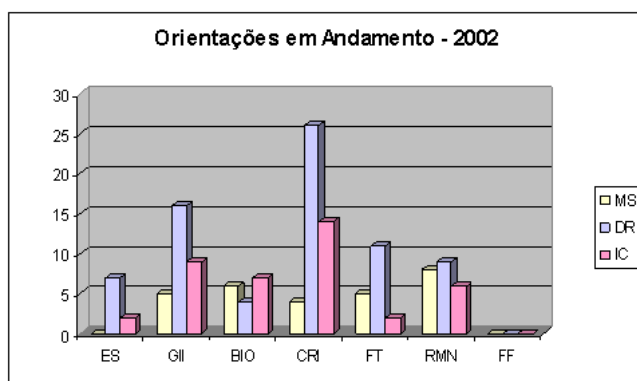
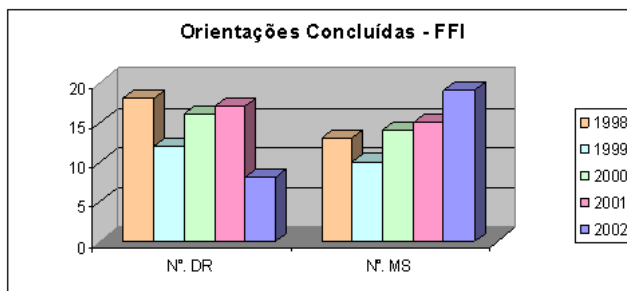
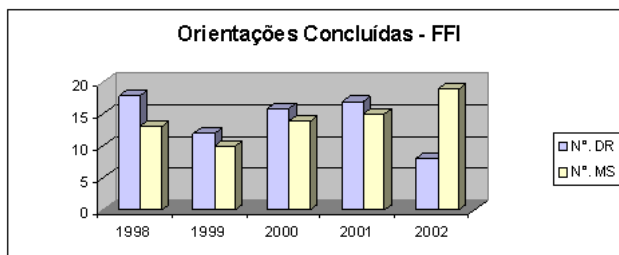
Quadro Docente do FFI

Evolução (1998-2002)



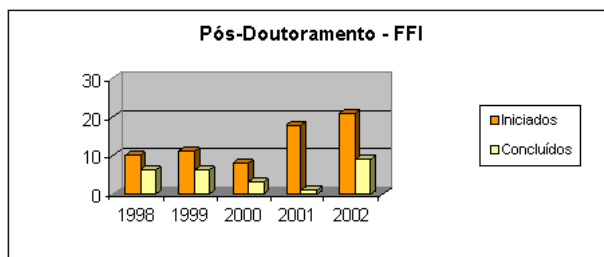
Atividades de Orientação

Evolução (1998-2002)



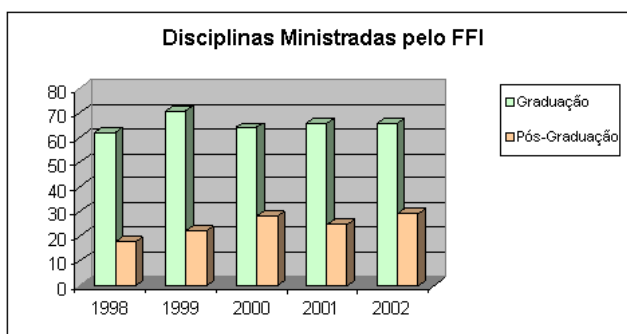
Atividades de Supervisão

Evolução (1998-2002)



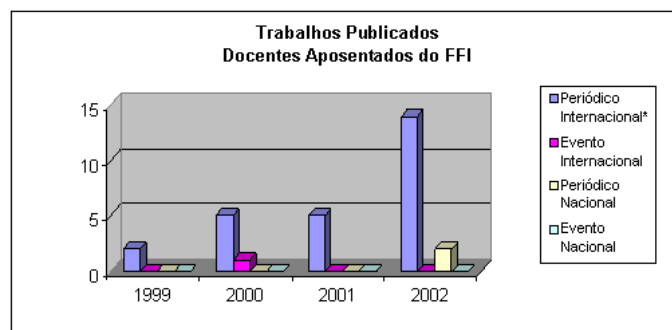
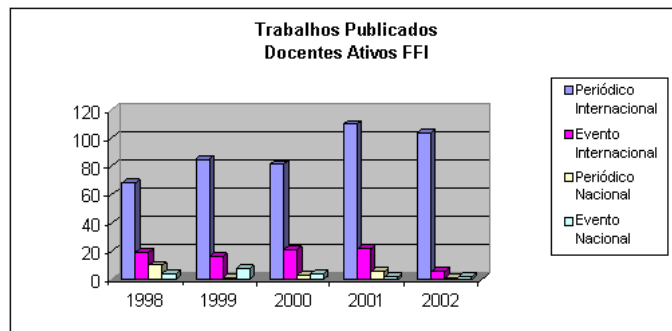
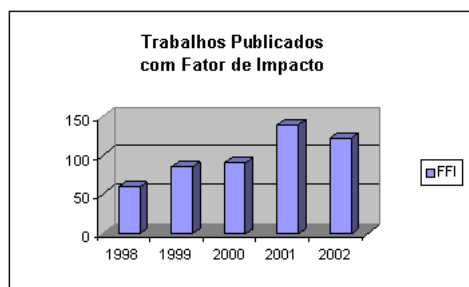
Disciplinas Ministradas

Evolução (1998-2002)

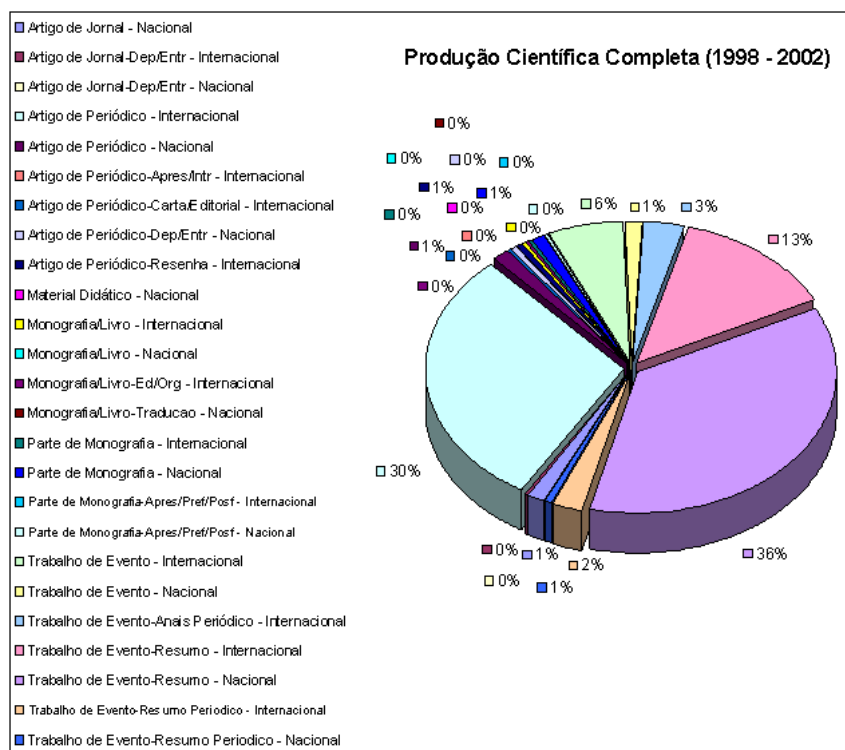


Produção Científica

Evolução (1998-2002)

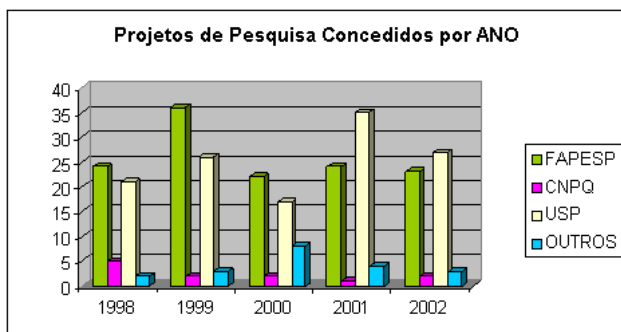
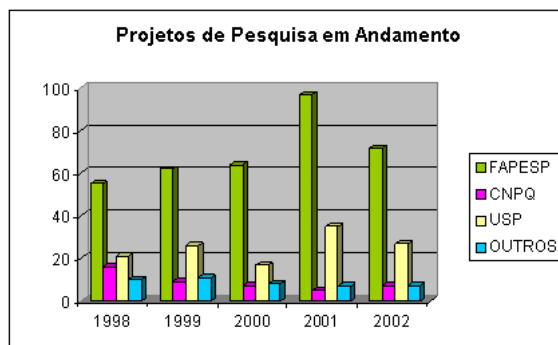


Análise completa da Produção Científica do Departamento de Física e Informática



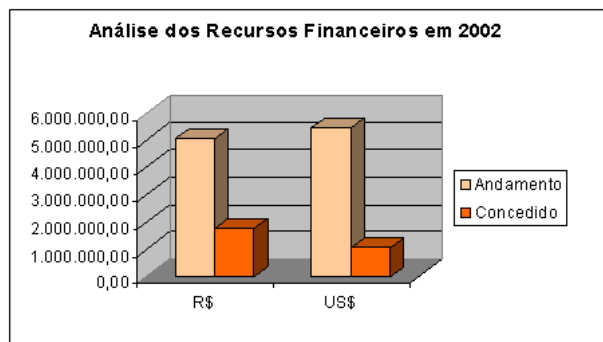
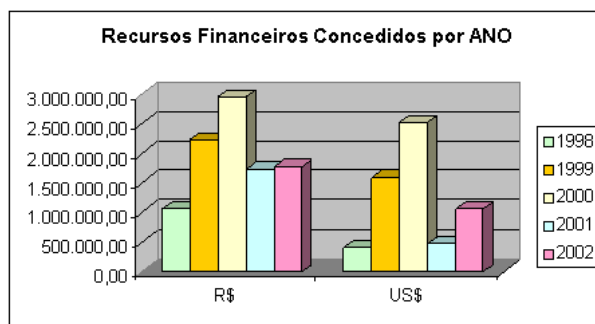
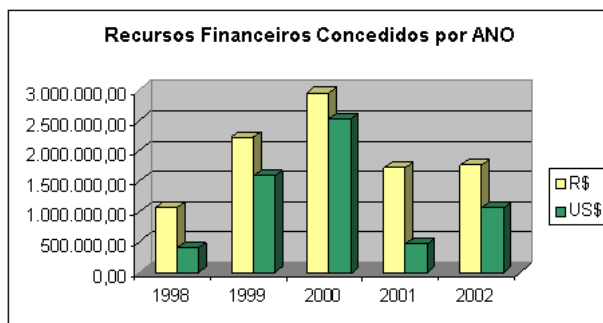
Projetos de Pesquisa Concedidos e em Andamento

Evolução (1998-2002)



Recursos Financeiros – Agências de Fomento

Evolução (1998-2002)



Apresentação



dos Quadros Sinópticos

[Docentes FFI](#)[Afastamento Exterior](#)[Linha de Pesquisa](#)[Produção Científica do FFI](#)[Produção Científica Individual](#)[Defesas - Mestrado e Doutorado](#)[Orientações de Pós-Graduação](#)[Orientações de Graduação](#)[Supervisão de Pós-Doutoramento](#)[Recursos Financeiros - Agências Fomento](#)[Recursos Financeiros - USP](#)

Conteúdo

Grupo de Biofísica Molecular e Espectroscopia	<u>14</u>
Grupo de Cristalografia	<u>54</u>
Grupo de Espectroscopia de Sólidos	<u>117</u>
Grupo de Física Teórica	<u>129</u>
Grupo de Filmes Finos	<u>163</u>
Grupo de Instrumentação e Informática	<u>169</u>
Grupo de Ressonância Magnética Nuclear	<u>188</u>

Biofísica

Molecular e Espectroscopia

ÍNDICE

GRUPO DE PESQUISA: BIOFÍSICA MOLECULAR E ESPECTROSCOPIA 29

A. PRINCIPAIS INDICADORES DE DESEMPENHO E OUTROS DADOS RELEVANTES 29

B. PRÊMIOS E DISTINÇÕES 29

C. ATIVIDADES DE PESQUISA 29

Recursos Humanos	30
Linhas de Pesquisa	32
Publicações	41
Recursos Financeiros – Projetos de Pesquisa	44
Bolsas Produtividade em Pesquisa	45

D. ATIVIDADES ACADÊMICAS E DE EXTENSÃO UNIVERSITÁRIA 46

Atividades Didáticas	46
Orientação Acadêmica e Bolsistas	46
Teses e Dissertações Concluídas por Docentes e Alunos	48
Participação em Comissões Julgadoras no IFSC	49
Participação em Comissões Julgadoras Externas ao IFSC	49
Assessoria no Julgamento e Avaliação de Projetos	51
Entrevistas Concedidas	51
Representação e Participação em Comissões no IFSC	51
Representação e Participação em Comissões Externas ao IFSC	52
Promoção e Organização de Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais	52
Participação em Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais	53

Grupo de Pesquisa: BIOFÍSICA MOLECULAR E ESPECTROSCOPIA

A. Principais Indicadores de Desempenho e Outros Dados Relevantes

O Grupo de Biofísica Molecular e Espectroscopia do IFSC é composto por 4 docentes/pesquisadores em regime de tempo integral, que desenvolvem projetos de pesquisa interdisciplinar, em colaboração com grupos de nosso Instituto e de outras instituições nacionais e internacionais.

A formação básica dos docentes concentra-se nas áreas de física, biologia e bioquímica. Diversas também são as áreas de formação pós universitária dos mesmos: biofísica, bioquímica e biologia molecular. As áreas de pesquisa aqui desenvolvidas buscam informações estruturais sobre proteínas naturais e recombinantes, peptídeos naturais e sintéticos e polímeros, além de sistemas modelos de moléculas biológicas. As ferramentas utilizadas para atingir os objetivos destes estudos são: métodos cromatográficos, de biologia molecular e espectroscópicos. No ano de 2002, o grupo teve 03 estudantes de pós-doutorado, 02 alunos concluíram doutorado, 03 alunos o mestrado, 06 doutorandos, 6 mestrandos e contamos também com 9 alunos de iniciação científica. Neste ano o grupo publicou 10 trabalhos em revistas internacionais e apresentou 28 resumos em congressos nacionais e internacionais.

O grupo participa do Centro de Biotecnologia Molecular Estrutural (CBME), juntamente com o grupo de Cristalografia de Proteínas. O CBME é um Centro de Pesquisa Inovação e Difusão (CEPID) financiado pela FAPESP, tendo como coordenador de difusão a Profa. Dra. Leila M. Beltrami.

Destaque em Ensino e Pesquisa, etc.: Os docentes do grupo destacam-se nas atividades de ensino, em particular em nível de graduação, onde todos tiveram avaliações acima da média ou na média daquelas apresentadas pela Unidade. Além de poderem ser considerados bons docentes, em geral os integrantes do grupo envolvem-se em atividades relacionadas a ensino de graduação, pós-graduação, além de outras relacionadas a difusão de ciências.

Outro aspecto que vem se ressaltando no grupo, nos últimos anos é a produção de textos didáticos para o ensino de algumas disciplinas da graduação, bem como textos de difusão científica e produção de material de apoio didático.

B. Prêmios e Distinções

C. Atividades de Pesquisa

A complexidade dos fenômenos moleculares associados aos organismos biológicos deve ser a razão principal das Ciências da Vida terem adotado, até recentemente, uma abordagem descritiva na análise dos fenômenos biológicos. Este aspecto vem se modificando nos últimos anos com o emprego de técnicas físicas aplicadas ao estudo de macromoléculas biológicas, de métodos bioquímicos modernos e da tecnologia do DNA recombinante, que permitem o estudo detalhado em níveis atômicos das estruturas biomoleculares.

Dentre as variadas ferramentas da Física que possibilitam o conhecimento em detalhe das estruturas das biomoléculas em nível atômico estão as técnicas espectroscópicas. Os estudos em desenvolvimento no grupo de Biofísica Molecular e Espectroscopia tentam interpretar as estruturas moleculares em função das interações em diferentes faixas do espectro eletromagnético. As espectroscopias eletrônicas, Dicroísmo Circular, Fluorescência, FT-IR, EPR (ressonância paramagnética eletrônica) permitem acompanhar mudanças conformacionais de biomoléculas na presença de ligantes, agentes químicos ou físicos, ação de diferentes solventes orgânicos, além de mecanismos moleculares envolvidos nos processos de desnaturação e reenovelamento de proteínas. Estes estudos têm sido facilitados e dinamizados com a expressão de proteínas recombinantes, de interesse biotecnológico, bem como a produção de mutantes, além do uso de sistemas modelos simplificados que permitem reproduzir e interpretar as propriedades espectroscópicas e funcionamento das moléculas biológicas.

Para maiores detalhes veja item sobre as linhas de pesquisa que estão sendo desenvolvidas pelo grupo.

Recursos Humanos

Docentes

1. **Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento** - Professor Associado (aposentou-se em 07/09/2001 e continua exercendo atividade de pesquisa no grupo); Universidade Federal de Goiás/UFG - 1963-1966 - Graduação em Licenciatura em Física; Universidade de São Paulo/USP - 1967-1967 - Especialização em Departamento de Física São Carlos; Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro/PUC-RJ - 1968-1971 - Mestrado em Física; Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro/PUC-RJ - 1972 - 1976 - Doutorado em Física; University Of California San Diego/U.C.S.D., EUA - 1980-1981 - Pós-doutorado; Universidade de São Paulo/USP - 1982 - Livre-docência.
2. **Profa. Dra. Leila Maria Beltrami** - Professor Associado, Coordenadora do Grupo de Biofísica Molecular e Espectroscopia; Faculdade de Filosofia Ciências e Letras Barão de Maua de Ribeirão Preto/FFCLBMRP-SP - 1970-1973 - Graduação em Ciências Biológicas Modalidade Médica; Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP - 1974-1976 - Curso de Pós-Graduação em Imunologia; Universidade de São Paulo/USP - 1976-1979 - Mestrado em Ciências Biológicas (Bioquímica); Universidade de São Paulo, USP - 1979-1985 - Doutorado em Ciências Biológicas (Bioquímica); University of Califórnia, EUA - 1991-1992 - Pós-doutorado; Instituto de Física de São Carlos/IFSC - 2000 - Livre-docência.
3. **Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo** - Professora Doutora; Universidade Federal de São Carlos/UFSCAR - 1986-1990 - Graduação em Bacharelado e Licenciatura em Ciências Biológicas; Universidade Federal de São Carlos/UFSCAR - 1991-1993 - Mestrado em Ecologia e Recursos Naturais; Universidade Federal de São Carlos/UFSCAR - 1993-1997 - Doutorado em Ecologia e Recursos Naturais
4. **Prof. Dr. Antonio José da Costa Filho** - Professor Doutor; Universidade de São Paulo/USP - 1991-1994 - Graduação em Física - São Carlos; Universidade de São Paulo/USP - 1995-1997 - Mestrado em Física [S.Carlos]; Universidade de São Paulo/USP - 1998-2001 - Doutorado em Física [S.Carlos]; Cornell University, C.U., Estados Unidos - 1999 - 2001 - Doutorado Sanduiche.

Administração

1. Ester Souza Apóstolo da Silva - Secretária

Técnicos

1. Derminda Isabel de Moraes - Técnico de Nível Médio
2. Roberto Fukuhara - Técnico de Nível Médio
3. Andressa Patrícia Alves Pinto - Técnico de Nível Superior
4. Luciano Douglas dos Santos Abel - Técnico de Nível Superior, Atividades de Difusão do CBME.

Professores visitantes

- Profa. Dra. Iseli Nantes - Universidade de Mogi das Cruzes - Centro de Interdisciplinar de Investigação Bioquímica - CIIB - 15 a 16/05/2002.
- Profa. Dra. Maria Helena de Souza Goldman - Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto/USP, 02/05/2002, Instituto de Química, USP, São Paulo-SP.
- Profa. Dra. Marilda das Dores Assis - Professora Doutora do Departamento de Química da Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto / USP, 06/06/2002.
- Profa. Dra. Rosemeire Aparecida da Silva de Luca - Professora do CECE - Centro de Engenharias e Ciências Exatas da UNIOESTE - Universidade Estadual do Oeste do Paraná, 10 a 19/06/2002.
- Profa. Dra. Maria Tereza Lamy - Professora Doutora - Instituto de Física da USP.
- Prof. Dr. Alzir A Batista - UFSCar - São Carlos.
- Prof. Dr. Rafael Calvo - INTEC, Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química, Santa Fé, Argentina.

Colaboradores Externos

- Iseli L. Nantes, Universidade Mogi das Cruzes, São Paulo-SP.
- Adelaide Faljoni Alário, Instituto de Química, USP, São Paulo-SP.
- Yassuco Iamamoto, Departamento de Química, Faculdade de Ciências e Letras de Ribeirão Preto/USP, Ribeirão Preto-SP.
- Marilda das Dores de Assis, Departamento de Química, Faculdade de Ciências e Letras de Ribeirão Preto/USP, Ribeirão Preto-SP.
- Ladislau Martin Neto, NPDI-EMBRAPA, São Carlos-SP.
- Oswaldo Baffa Filho, Depto. De Física e Matemática, Fac. De Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto/USP, Ribeirão Preto-SP.
- Marcel Tabak, Instituto de Química/USP, São Carlos-SP.
- Armando Vieira, UFSCar, São Carlos-SP.
- Alzir A. Batista, UFSCar, São Carlos-SP.
- Maria Teresa Lamy, Instituto de Física/USP, São Paulo-SP.
- Sonia R. Wanderley Louro, Depto. De Física da PUC, Rio de Janeiro-RJ.
- Rafael Calvo, INTEC, Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química, Santa Fé, Argentina.
- Renato de Azevedo Moreira, Centro de Ciências, Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular, Fortaleza-CE
- Ana Cristina de Oliveira Monteiro Moreira, Universidade de Fortaleza, Fortaleza-CE
- Ariel M. Silber, Instituto de Tecnología Biológica; Universidad Nacional del Litoral; Santa Fé, Argentina.
- Maria Luiza Vilela Oliva, Depto. de Bioquímica, Escola Paulista de Medicina, UniFeSP, São Paulo-SP.
- Georgina Tonarelli, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fé, Argentina.
- Heloisa S. Selistre de Araújo, UFSCar, São Carlos - SP.
- Jack H. Freed - Advanced Center for ESR Technology - Cornell University - EUA.
- Mingtao Ge, ACERT, Cornell University - EUA
- Esteban Serra, Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario. Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas. Suipacha 531. CP 2000. Rosario, Argentina.

Linhas de Pesquisa

Título 1: "Aplicações da Técnica de Ressonância Magnética Eletrônica em seus Modos Pulsado e Convencional ao Estudo de Metaloproteínas"

Pessoal envolvido:

- Prof. Dr. Antonio José da Costa Filho, Grupo de Biofísica, IFSC
- Prof. Dr. Claudio José Magon - Grupo de Ressonância Magnética, IFSC
- Profa. Dra. Leila Maria Beltrami - Grupo de Biofísica, IFSC
- Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento - Grupo de Biofísica, IFSC
- Prof. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo - Grupo de Biofísica, IFSC
- Prof. Dr. Renato de Azevedo Moreira - Dep. Bioquímica, UFC, Ceará
- Marco Antonio Leite, Mestrando, Grupo de Biofísica, IFSC-USP
- Derminda Isabel de Moraes, Téc. Especializado, IFSC-USP
- Roberto Fukuhara, Téc. Especializado, IFSC-USP
- Andressa Patrícia Alves Pinto, Téc. Especializado Nível Superior -IFSC/USP

Agência Financiadora: CNPq, CAPES, FAPESP.

Objetivos: A técnica de RPE em seus modos convencional (CW) e pulsado encontra grande aplicabilidade no estudo de centros paramagnéticos (e.g., íons de metais de transição) presentes em diversas proteínas. Neste projeto pretende-se estudar as enzimas clorocatecol 1,2-dioxigenase e Thi1, bem como uma classe de proteínas ligantes de açúcar (lectinas). Cada uma delas tem sua importância biológica: a primeira é uma enzima que cliva compostos aromáticos de difícil degradação no ambiente, a Thi1 é supostamente uma enzima que participa de processo de reparo de DNA e as lectinas são importantes, por exemplo, no processo de reconhecimento celular. A possibilidade de realizar experimentos de RPE pulsado em tais sistemas, principalmente a técnica de "electron spin echo envelope modulation" (ESEEM), permite a determinação do ambiente de coordenação daqueles sítios metálicos, bem como mudanças que

ocorrerem durante os respectivos processos reacionais.

Título 2: "Estrutura Dinâmica de Membranas de Interesse Biológico e Interações Lipídios-Peptídeos através de Ressonância Magnética Eletrônica"

Pessoal envolvido:

- Prof. Dr. Antonio José da Costa Filho, Grupo de Biofísica, IFSC
- Prof. Dr. Jack H. Freed, ACERT, Cornell University
- Dr. Mingtao Ge, ACERT, Cornell University
- Ana Paula Citadini, Iniciação Científica, Grupo de Biofísica, IFSC-USP
- Dermina Isabel de Moraes, Téc. Especializado, IFSC-USP

Agência Financiadora: CNPq, FAPESP.

Objetivos: A técnica de Ressonância Paramagnética Eletrônica tem sido muito utilizada no estudo da estrutura dinâmica de biomembranas. Sua escala de tempo favorável e a disponibilidade comercial de marcadores de spin facilmente incorporáveis em tais membranas permite o estudo das diferentes fases lipídicas e como estas variam em função de fatores externos (por exemplo, temperatura) e/ou componentes das membranas. O estudo da fase de líquido ordenado, induzida pela presença de colesterol em altas concentrações, e da transição da fase lamelar para a hexagonal inversa são os principais objetivos do presente projeto. A primeira tem participação fundamental no processo de transdução de sinais do meio extracelular para o intracelular, ao passo que a última ocorre em situações onde há necessidade da membrana ser curvada, como em processos de exocitose e endocitose. O projeto pretende estudar aquelas fases lipídicas em membranas modelo compostas de lipídios específicos para cada fim e de marcadores de spin que monitorem as diferentes regiões das bicamadas (região hidrofóbica e da cabeça polar).

Resultados: Elaboração dos artigos:

1. Costa-Filho, A.J.; Shimoyama, Y.; Freed, J.H. "A 2D-ELDOR study of the liquid ordered phase in multilamellar vesicle membranes" (in press **Biophysical Journal**).
2. Costa-Filho, A.J.; Crepeau, R.H.; Borbat, P.P.; Ge, M.; Freed, J.H. "Lipid-Gramicidin interactions: Dynamic structure of the boundary lipid by 2D-ELDOR" (aceito em **Biophysical Journal**).

Título 3: "Dinâmica de spins de centros paramagnéticos em substâncias húmicas e sistemas poliméricos"

Pessoal envolvido:

- Prof. Dr. Antonio José da Costa Filho, Grupo de Biofísica, IFSC
- Prof. Dr. Claudio José Magon, IFSC-USP
- Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento, IFSC-USP
- Dr. Ladislau Marin Neto, EMBRAPA/CNPq
- Ronny Rocha Ribeiro, Doutorado, Grupo de Ressonância, IFSC-USP
- Roberto Fukuhara, Téc. especializado, IFSC-USP

Agência Financiadora: CNPq, FAPESP.

Objetivos: A matéria orgânica presente no solo constitui-se de uma mistura de compostos vegetais e animais em vários estágios de decomposição e substâncias orgânicas sintetizadas química e biologicamente. Este material complexo pode ser fracionado em dois tipos de substâncias: as húmicas (ácidos húmicos, ácidos fúlvicos e húmicas) e as não húmicas (proteínas, aminoácidos, polissacarídeos, ácidos orgânicos de baixo peso molecular, ceras e outros). As substâncias não húmicas compreendem substâncias orgânicas de composição definida, pertencentes a grupos bem conhecidos da química orgânica e geralmente correspondem aos compostos facilmente degradados por microorganismos, tendo, normalmente, tempo curto de vida nos solos e sedimentos. O trabalho proposto pretende estudar as propriedades magnéticas e estruturais de centros paramagnéticos presentes em substâncias húmicas, através das técnicas da Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE). A metodologia experimental envolverá a aplicação das técnicas de onda contínua (técnicas convencionais ou CW), como também aquelas no domínio do tempo (técnicas pulsadas, baseadas na detecção do eco de spins), no estudo de amostras de substâncias húmicas (a) purificadas e (b) tratadas com soluções contendo íons metálicos como Fe³⁺, Mn²⁺ e Cu²⁺.

Título 4: "Complexos metálicos de coordenação com pequenos ligantes de interesse biológico (Cu, ...amino-ácidos, dipeptídeos, etc...)"

Pessoal envolvido:

- Prof. Dr. Antonio José da C. Filho, IFSC-USP
- Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento, IFSC-USP
- Prof. Dr. Rafael Calvo, INTEC/Santa Fé-Argentina
- Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano, IFSC-USP
- Ernani Damião Vieira, Mestrando, Grupo de Biofísica, IFSC-USP

Agência Financiadora: FAPESP, CNPq.

Objetivos: Consiste em estudar a formação de diferentes complexos de coordenação em função do pH e caracterizá-los de acordo com os grupos protonáveis participantes, simetrias dos complexos e cristalização. Com os cristais obtidos, estudar sua estrutura por difração de raios X e suas propriedades magnéticas que favorecem a formação de redes magnéticas de dimensionalidade baixa. Pode-se daí extrair a interação de troca entre os íons paramagnéticos.

Resultados: Elaboração do artigo: 1. Costa-Filho, A. J., Calvo, R., and Nascimento, O. R. "Magnetic properties and exchange pathways of Cu(II)Gly-Trp" (in preparation). Vide linha de pesquisa intitulada "Estudo comparativo de hemoproteínas e proteínas de ferro de diferentes espécies sob a ação de diferentes moduladores conformacionais".

Título 5: "Estudo comparativo de hemoproteínas e proteínas de ferro de diferentes espécies sob a ação de diferentes moduladores conformacionais."

Pessoal envolvido:

- Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento - DF/IFSC-USP/São Carlos-SP
- Marcel Tabak (Dr.) - DQFM/IQSC-USP/S. Carlos-SP
- Eliane Wajnberg (Dra.) - CBPF/Rio de Janeiro-RJ
- Sonia R. Wanderley Louro (Dr.) - DF/PUC/Rio de Janeiro-RJ
- Adelaide Faljoni-Alário (Dr.) - DB/IQUSP/São Paulo-SP
- Izeli L. Nantes (Dra.) - DPC/FCM/UNICAMP/Campinas-SP
- Marco Antonio Leite (Mestrando) - FFI/IFSC-USP/São Carlos-SP
- Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo (Dra.) - DF/IFSC-USP/São Carlos-SP
- Prof. Dr. Antonio José da C. Filho (Dr.) - DF/IFSC-USP/São Carlos-SP

Agência Financiadora: FAPESP, CNPq.

Objetivos: Consiste no estudo de diferentes hemoproteínas, como Hemoglobinas, Mioglobinas, Citocromo C de diferentes espécies e proteínas de ferro como clorocatecol-1,2 dioxigenase, suas interações com modelos de membranas biológicas, ligantes do sítio ativo e variando os moduladores conformacionais como temperatura, pH, nível de hidratação e agentes moleculares. Com o citocromo c estamos a sua participação nos mecanismos de apoptose celular.

Resultados: Esta e as demais linhas de pesquisa relacionadas a seguir se trata de vários sub-projetos que estão sendo desenvolvidos, estes resultados são mais claros nos trabalhos que tem sido publicados. No entanto podemos apresentar o seguinte sumário:

- Temos contribuído para a compreensão do papel dos resíduos moleculares ao redor do sítio ativo de hemoproteínas como estabilizadores e aumento de eficiência funcional destas proteínas. Ultimamente temos centralizado nossos esforços no entendimento do funcionamento da hemoproteína CITOCROMO C e suas interações com membranas utilizando-se as técnicas de EPR, Dicroísmo Circular Magnético e absorção eletrônica. Esta proteína aparece em todos os sistemas vivos e trabalha a nível da organela mitocondrial como transportadora de elétrons. Mais recentemente provou-se que ela está envolvida com o processo de morte programada da célula, fenômeno conhecido como APOPTOSE CELULAR como enzima peroxidase no citosol celular, isto é, fora da organela mitocondrial. Nossos resultados contribuem para o entendimento do papel do citocromo c neste fenômeno.
- Com relação às porfirinas temos identificado intermediários moleculares e rotas de processos catalíticos e a importância das modificações estruturais nos mecanismos de ação destas moléculas; acompanhamentos de processos catalíticos destas proteínas ancoradas em matrizes sólidas através da técnica de RPE tem sido realizadas com excelente sucesso.
- Temos medido através da técnica de RPE interações magnéticas tão fracas quanto alguns décimos de milikelvin e discutido aspectos de ligações químicas fracas nos mecanismos de "super exchange" nas interações. Estes resultados permitem entender caminhos de intercâmbio eletrônico em processos de transferências de elétrons em amostras biológicas, tais como fotossíntese e processos mitocondriais.
- Temos contribuído com modelos de interações magnéticas em polímeros condutores eletrônicos, no capítulo de desenvolvimento de novos materiais, com a utilização de RPE pulsado acompanhando processos dinâmicos de interação spin-spin em função da temperatura, desde 4 K até temperatura ambiente.

Título 6: "Estudos de processos de oxi-redução e mecanismos de reação de porfirinas modelos."

Pessoal envolvido:

- Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento - DF/IFSC-USP/São Carlos-SP
- Yassuco Iammamoto (Dra.) - DQ/FFCL-USP/Ribeirão Preto-SP

- ♦ Marilda das Dores Assis (Dra.) - DQ/FFCL/USP/Ribeirão Preto-SP
- ♦ Marcel Tabak (Dr.) - DQFM/IQSC/USP/S. Carlos-SP
- ♦ Alunos de pós-graduação de Química - DQ/FFCL/USP/Ribeirão Preto-SP

Agência Financiadora: FAPESP, CNPq.

Objetivos: Consiste em estudar os processos de oxi-redução e mecanismos de reação do íon Fe(III) - Fe(IV) de anéis porfirínicos modificados para compreender o papel catalítico com diferentes substratos e tentar identificar e caracterizar a existência e estabilidade do íon ferril (Fe(IV)). Estes estudos servem como modelos para a compreensão do funcionamento da enzima Citocromo C-oxidase existente na maioria dos seres e plantas.

Resultados: Vide linha de pesquisa intitulada "Estudo comparativo de hemoproteínas e proteínas de ferro de diferentes espécies sob a ação de diferentes moduladores conformacionais".

Título 7: "Complexos metálicos de íons de Cu(II) e Zn(II) com peptídeos biologicamente ativos."

Pessoal envolvido:

- ♦ Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento (Dr.) - FFI/IFSC/USP/São Carlos-SP
- ♦ Marcel Tabak (Dr.) - DQFM/IQSC/USP/São Carlos-SP
- ♦ Maria Tereza Lamy (Dra.) - DFE/IFUSP/São Paulo-SP
- ♦ Barney Leroy Bales (Dr.) - Dept. Physics and Astronomy/CSUN-CA/USA
- ♦ Alunos de pós-graduação de Física - DFE/IFUSP/São Paulo-SP

Agência Financiadora: FAPESP, CNPq.

Objetivos: Consiste em estudar a complexação dos íons Cu(II) e Zn(II) com peptídeos (hormonais, opioides e vaso-pressores) entender seus papéis inibidores e potenciadores da atividade biológica. Tanto a relação estequiométrica quanto as mudanças estruturais induzidas são investigadas com o objetivo de ver o papel da especificidade estrutural na ação biológica destes peptídeos, uma vez que, por serem pequenos (8 a 20 amino-ácidos) suas estruturas são bastante flexíveis. Também são estudadas as interações destes peptídeos com membranas modelos que mimetizam a ação destes hormônios nos sistemas vivos.

Resultados: Vide linha de pesquisa intitulada "Estudo comparativo de hemoproteínas e proteínas de ferro de diferentes espécies sob a ação de diferentes moduladores conformacionais".

Título 8: "Formação e caracterização de complexos de rutênio com valências II e III com ligantes diversos."

Pessoal envolvido:

- ♦ Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento (Dr.) - FFI/IFSC/USP/S. Carlos-SP
- ♦ Alzir A. Batista (Dr.) - DQ/UFSCar/São Carlos-SP
- ♦ Queite Antonia de Paula (Doutoranda) - DQ/UFSCar/São Carlos-SP
- ♦ Estudantes de pós-graduação em química - DQ/UFSCar/São Carlos-SP

Agência Financiadora: FAPESP, CNPq.

Objetivos: Consiste na formação de complexos de rutênio com grupos fosfinas, imidazóis, monóxido de carbono e outros. Os compostos são sintetizados, purificados e cristalizados e depois estudados por diversas técnicas. Nos estudos eletroquímicos mudanças na valência do íon de Ru são induzidas e estudos voltamográficos são realizados para se conhecer a estabilidade dos compostos formados. Estruturas cristalográficas por raios X são feitas e todos os estudos de simetria são realizados por espectroscopia de EPR e absorção eletrônica no UV, visível e IV. Estes complexos estão sendo produzidos também com o uso dos ligantes de interesse biológico como amino-ácidos e peptídeos.

Resultados: Vide linha de pesquisa intitulada "Estudo comparativo de hemoproteínas e proteínas de ferro de diferentes espécies sob a ação de diferentes moduladores conformacionais".

Título 9: "Estudos de complexação de metais e mecanismos de permeação de pequenas moléculas de marcadores de spin através de capas mucilaginosas de algas unicelulares de água doce."

Pessoal envolvido:

- ♦ Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento (Dr.) - DFI/IFSC/USP/São Carlos-SP
- ♦ Armando Vieira (Dr.) - DB/UFSCar/São Carlos
- ♦ Cristina Souza Freire Nordi (Dra.) - Pós-Doutoranda bolsa FAPESP

Agência Financiadora: FAPESP, CNPq.

Objetivos: Consiste no estudo de complexação de metais paramagnéticos com a estrutura de polissacarídeos de capas mucilaginosas de Algas do tipo Spondylosium existentes em rios e lagoas brasileiras. Estas Algas se mostram resistentes à poluição metálica e foi mostrado por nossos estudos anteriores que estas capas são capazes de se ligarem com metais impedindo que os mesmos "envenenem" as células. Estamos interessados em compreender o papel destas capas como mecanismos seletivos de permeação de moléculas e metais para dentro das células de Algas. Para isto a técnica de EPR e marcadores de spin estão sendo utilizados.

Resultados: Vide linha de pesquisa intitulada "Estudo comparativo de hemoproteínas e proteínas de ferro de diferentes espécies sob a ação de diferentes moduladores conformacionais".

Título 10: "Estudos estruturais e funcionais de Lectinas extraídas de sementes duras de frutas e plantas"

Pessoal envolvido:

- ♦ Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento (Dr.) - FFI/IFSC/USP/S. Carlos-SP
- ♦ Profa. Dra. Leila Maria Beltrami (Dr.) - DFI/IFSC/USP/S. Carlos-SP
- ♦ Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo (Dr.) - FFI/IFSC/USP/S. Carlos-SP
- ♦ Prof. Dr. Antonio José da Costa Filho - FFI/IFSC/USP/S. Carlos-SP

Agência Financiadora: FAPESP, CNPq.

Objetivos: Consiste nos estudos funcionais e estruturais de Lectinas extraídas e purificadas de sementes duras de frutas e plantas. Estas proteínas tem a propriedade de apresentar um ou mais sítios de ligação de diferentes tipos de açúcares, de forma muitas vezes específicas podendo, por esta propriedade, ser utilizadas como ferramentas biológicas para identificação de receptores de superfícies de membranas de células. Podem também ser utilizadas como bloqueadoras de sítios de ligação comuns de vírus. As propriedades estruturais estão sendo estudadas com a utilização de difração de raios X e fluorescência.

Resultados: Vide linha de pesquisa intitulada "Estudo comparativo de hemoproteínas e proteínas de ferro de diferentes espécies sob a ação de diferentes moduladores conformacionais".

Título 11: "Investigação dos estados metálico e isolante em polímeros condutores derivados de politiofeno e outros."

Pessoal envolvido:

- ♦ Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento (Dr.) - DFI/IFSC/USP/S. Carlos-SP
- ♦ Ligya Walmsley (Dra.) - DF/UNESP/Rio Claro
- ♦ Ernesto C. Pereira (Dr.) - DQ/UFSCar/São Carlos-SP
- ♦ Agnieszka Pawlicka (Dra.) - DQFM/IQSC/USP/São Carlos-SP
- ♦ Prof. Dr. Claudio José Magon (Dr.) - FFI/IFSC/USP/S. Carlos-SP

Agência Financiadora: FAPESP, CNPq.

Objetivos: Este projeto consiste no estudo dos derivados de politiofeno preparados eletroquimicamente e em alguns casos quimicamente, em função de várias variáveis como condições de síntese, mudança na cadeia alquil, mudança no dopante, pressão de pastilhamento e história térmica. Utilizando Ressonância Paramagnética Eletrônica de Onda Contínua e Pulsada, medidas de condutividade d.c. e impedância a.c. na faixa de 1Hz a 1MHz pretendemos estudar os estados metálico e isolante (normal e CDW) e de como o aparecimento e propriedades desses estados são sensíveis às mudanças nas variáveis de preparação do sistema. O polímero condutor eletrônico polianilina também tem sido alvo de nossos estudos.

Resultados: Vide linha de pesquisa intitulada "Estudo comparativo de hemoproteínas e proteínas de ferro de diferentes espécies sob a ação de diferentes moduladores conformacionais".

Título 12: "Estudos Estruturais e Correlações com a Função Biológica entre Formas Nativas, Desnaturadas e Reenoveladas, Investigadas por Métodos Espectroscópicos, de Proteínas de Interesse Biotecnológico"

Pessoal envolvido:

- Profa. Dra. Leila Maria Beltrami - Profa. Dra., IFSC-USP – Coordenadora do projeto
- Patrícia Targon Campana, pós-graduanda, Pós-Doutoranda, área física aplicada, IFSC-USP
- Cecília S. Caruso, pós-graduanda, doutorado, área física aplicada, IFSC-USP
- Prof. Dr. Richard C. Garrat, Prof. Associado, IFSC-USP
- Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araujo, Profa. Dra., IFSC-USP
- Prof. Dr. Otavio Thiemann, Grupo de Cristalografia, IFSC-USP
- Derminda Isabel de Moraes, Téc. Especializado, IFSC-USP;
- Roberto Fukuhara, Téc. Especializado, IFSC-USP;
- Andressa Patrícia Alves Pinto, Téc. Especializado Nível Superior -IFSC/USP

Agência Financiadora: FAPESP, CNPq, CAPES, PRONEX.

Objetivos: Entender como e porque as proteínas adotam um enovelamento específico, entre todos os possíveis, e só neste têm atividade biológica é um dos problemas mais interessantes da natureza. O conhecimento da estrutura tridimensional de um grande número de proteínas mostra que estas podem adotar o mesmo enovelamento com seqüências muito diferentes. Isso implica que, desenvolvendo-se um método para se enovelar uma proteína de uma certa família, o enovelamento dos demais membros desta família estaria determinado. Nos estudos sobre mecanismos de enovelamento/reenovelamento de proteínas são utilizados métodos bioquímicos, biofísicos e teóricos, sendo que "in vitro", o estado inicial deste estudo é a proteína desnaturada e a recuperação de sua atividade biológica deve ser a prova de seu reenovelamento. Neste projeto serão estudadas representantes de duas classes de proteínas: lectinas e enzimas recombinantes. Lectinas são proteínas ligantes de carboidratos e de glicoproteínas e estão envolvidas numa grande diversidade de fenômenos. Lectinas de origem vegetal, estão envolvidas em fenômenos de defesa destes, e também funcionam como proteínas de reserva. Elas participam tanto "in vivo como in vitro", de fenômenos de reconhecimento de carboidratos na superfície celular, bem como no esclarecimento da estrutura destas., o que faz delas ferramentas muito empregadas em biotecnologia. Lectinas de Moráceas (gênero *Artocarpus*): Frutalina e KM+, serão os alvos de nossos estudos.

A expressão de algumas enzimas recombinantes, em particular de protozoários, que são vistas como potenciais alvos para o desenvolvimento de drogas inibidoras de suas funções, também vem sendo estudadas por nós. No presente projeto será abordado o estudo de uma enzima recombinante, de *Leishmania tarentolae*, a Adenina Fosforibosil Transferase (APRT) que tem a capacidade metabólica de absorver do meio circundante a adenina e converte-la a nucleotídeo pela chamada via de "recuperação" de purinas.

Estes estudos terão como objetivo a caracterização estrutural, bem como o mecanismo de desnaturação e/ou renaturação das proteínas KM+, Frutalina e da enzima APRT. Para isto serão aliados métodos cromatográficos de alta resolução, métodos espectroscópicos (dicroísmo circular, fluorescência estática e dinâmica e infra-vermelho) e métodos cristalográficos na expectativa de que o conhecimento das estruturas e dos mecanismos moleculares envolvidos nos fenômenos biológicos em que estas proteínas participam, propiciará o desenvolvimento de drogas planejadas que interfiram com a atividade das mesmas.

Resultados: O estudo de enovelamento de proteínas tem sido um problema de fundamental importância em biofísica e biologia molecular. Neste trabalho, estudamos os processos de desnaturação e renovelamento das lectinas jacalina e frutalina. Estas lectinas são tetraméricas, apresentam alta homologia estrutural, porém diferem em atividade biológica, sendo a frutalina mais potente. Apesar desta homologia, estas lectinas diferem também nos processos de desnaturação e renovelamento como função da temperatura e o comportamento frente ao desnaturante químico hidrócloro de guanidina (GndHCl).

Ambas proteínas foram desnaturadas pela ação de GndHCl e suas curvas de desnaturação medidas por espectroscopia de fluorescência e CD. As medidas de fluorescência da frutalina deram valores de estabilidade conformacional de 17,12 kJ/mol e 12,34 kJ/mol, na presença e na ausência de D-Galactose, enquanto a jacalina forneceu valores de 8,12 kJ/mol para a transição NI e 5,61 kJ/mol para a transição IU em PBS. Os valores na presença do açúcar foram similares. Nos estudos da frutalina foram separadas as formas nativa, desnaturada, renovada e uma forma molecularmente distinta chamada mal-enovelada, por cromatografia de exclusão molecular. Estas formas foram analisadas por atividade hemaglutinante e espectroscopias de CD e fluorescência. Todos os resultados obtidos confirmaram a ocorrência do renovelamento de ambas lectinas e que os monômeros renovados, depois de alcançarem sua estrutura tridimensional, se associam espontaneamente para a formação dos tetrameros.

Enquanto as células humanas sintetizam purinas pela via de novo e pela via de recuperação, protozoários parasitas as sintetizam somente pela via de recuperação. Por essa razão, as enzimas que compõem essa via são importantes alvos para o desenvolvimento de novas drogas antiparasitárias. A enzima APRT converte adenina e α -D-5-fosforibosil 1-pirifosfato (PRPP) a AMP na via de recuperação de purinas. Nesse trabalho, a APRT e a APRT-His recombinantes foram caracterizadas por métodos bioquímicos e espectroscópicos. As expressões do gene apt contidos nos vetores pET29+ (Novagen) e pQE30 (Qiagen) renderam 5 e 10 mg.mL⁻¹ de APRT e APRT-His, respectivamente, na forma solúvel. A APRT permaneceu estável e homogênea in vitro em Tris pH 7,5 contendo 5 mM de MgSO₄ e 150 mM de KCl, mas a APRT-His mostrou-se instável e insolúvel nesse pH e acima de 0,5 mg.mL⁻¹. O estudo de solubilidade revelou que a APRT-His é parcialmente estabilizada em Tris pH 8,5 contendo 150 mM de KCl, devendo ser purificada e mantida nesse tampão durante os ensaios espectroscópicos e a adição de 50 mM de histidina mostrou-se eficiente para a concentração da enzima até 8mg.mL⁻¹. A caracterização bioquímica da APRT e da APRT-His revelou que elas são dimericas nos seus tampões e têm PI igual a 6,45±0,20 e 7,7±0,16, respectivamente. Os ensaios de atividade enzimática indicaram que a APRT é duas vezes mais ativa do que a APRT-His. Os espectros de CD da APRT-His foram mais intensos do que os espectros da APRT e mostraram perfil de hélice α . Os resultados da desconvolução revelaram que a APRT-His tem cerca de 10% mais hélice α do que a APRT. O valor de teor de estrutura secundária da APRT equivale aos valores extraídos dos dados cristalográficos da APRT de L. donovani e de L. tarentolae. Os espectros de emissão de fluorescência mostraram que a APRT-His e a APRT possuem máximos de emissão em 342 e 332 nm, respectivamente. Além disso, eles indicaram que o PRPP e o AMP suprimem a fluorescência do Trp presente na APRT. A supressão foi relacionada à posição dos ligantes localizados no sítio ativo da enzima e a ausência de supressão nas amostras de APRT-His foi relacionada à presença de Mg²⁺. Os resultados indicam que a presença dos resíduos de histidina na região N-terminal da APRT-His induziu a modificação estrutural da enzima levando a precipitação contínua. Nesse sentido, a ausência dos resíduos de histidina incorporados à enzima favoreceu a estabilidade da proteína *in vitro*.

Título 13: "Interação de seqüências peptídicas de proteínas virais com sistemas biomiméticos"

Pessoal envolvido:

- Profa. Dra. Leila Maria Beltrami - Profa. Dra., IFSC-USP – Coordenadora do Projeto
- Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araujo, Profa. Dra., IFSC-USP
- Prof. Dr. Antonio José da Costa Filho, Professor Doutor, IFSC-USP
- Prof. Dr. Osvaldo Novais de Oliveira Jr, Professor Associado, IFSC-USP
- Profa. Dra. Maria Lúcia Bianconi, Professor Adjunto, Dpto. de Bioquímica Médica – UFRJ
- Georgina Tonarelli, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fé, Argentina.
- Javier Lottersberger, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fé, Argentina
- Patrícia Targon Campana, pós-graduanda, Pós-Doutoranda, Área Física Aplicada, IFSC-USP
- Marli Leite de Moraes, Mestranda, IFSC/USP

Agência Financiadora: FAPESP, CNPq, CAPES, PRONEX.

Objetivos: A existência dos seres vivos está intrinsecamente relacionada às moléculas anfipáticas, desde a estabilização de proteínas globulares à formação de organelas complexas e estruturas de membranas. Como a grande maioria dos processos biológicos ocorre nas interfaces, particularmente entre o meio extra e intracelular, as membranas desempenham um papel fundamental nestes mecanismos. Assim a complexidade das membranas plasmáticas e das interações de seus constituintes com proteínas, peptídeos e outros compostos, tem originado questões interessantes, como exemplo, o quanto a estrutura secundária é importante na inserção e translocação, induzindo modificações em uma ou mais faces da membrana. Este projeto tem como objetivo estudar as interações de vesículas artificiais e regiões de algumas proteínas virais, cujas seqüências peptídicas estejam envolvidas na interação com células alvo. As proteínas p24 do vírus HIV-1 e a p26 do vírus da anemia infecciosa equina (EIAV), são alvos interessantes por possuírem regiões onde estão localizados os determinantes antigênicos (N-terminal) e regiões que demonstram pouca imunoreatividade (C-terminal), porém provavelmente estão envolvidas nas interações do vírus com a célula a ser infectada. Assim, pretendemos investigar a interação e comparar as modificações estruturais de peptídeos, das proteínas p24 e p26, com vesículas contendo diferentes tipos de lipídeos. Os segmentos peptídicos a serem estudados correspondem à seqüência 303-326 da proteína p24 do vírus HIV-1 e do segmento 318-346 da proteína p26 do vírus da anemia infecciosa equina. Estes peptídeos foram sintetizados nas versões nativa, modificada (contendo alguns resíduos incorporados em suas regiões N e C-terminais), modificado cíclico (oxidados para que as duas cisteínas presentes formem uma ponte S-S).

Estes estudos serão realizados utilizando-se técnicas espectroscópicas, em particular, dicroísmo circular, fluorescência e FT-IR, nos laboratórios do Centro de Biotecnologia Molecular Estrutural (CBME), do Instituto de Física de São Carlos.

O objetivo principal deste projeto é estudar a interação dos segmentos peptídicos 303-326 da proteína p24 do vírus HIV-1 e 318-346 da proteína p26 do vírus da anemia infecciosa equina, ambos em suas versões nativo (p24-n e p26), modificado (p24-m), modificado cíclico (p24-mc) e cíclico (p26-c) com vesículas constituídas de diferentes tipos de lipídeos. Estes estudos serão realizados utilizando-se técnicas espectroscópicas, em particular, dicroísmo circular, fluorescência e FT-IR, nos laboratórios do Centro de Biotecnologia Molecular Estrutural (CBME), do Instituto de Física de São Carlos.

Resultados: Os resultados deste tipo de abordagem têm como perspectivas, além do conhecimento dos mecanismos moleculares envolvidos na interação de peptídeos e/ou proteínas com membranas, o desenho de peptídeos que possam atuar como inibidores da interação destes e outros vírus com suas células alvos específicas.

Título 14: "Clonagem e caracterização do gene de uma quimerolectina de *Abrus pulchellus* (Leguminosae): expressão de seus domínios"

Pessoal envolvido:

- Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo - Profa. Dra. do Grupo de Biofísica, IFSC.
- Profa. Dra. Leila Maria Beltrami - Profa. Dra. do Grupo de Biofísica, IFSC;
- Prof. Dr. Otávio Thiemann - Prof. Dr. Do Grupo de Cristalografia do IFSC.

- Leandro S. Goto - Doutorando – CAPES/IFSC.
- Daiane Hansen – Mestranda/UNIFESP.
- Derminda Isabel de Moraes, Téc. Especializado, IFSC-USP;
- Andressa Patrícia Alves Pinto, Téc. Especializado Nível Superior -IFSC/USP

Agência Financiadora: FAPESP, CNPq, PRONEX.

Objetivos: As lectinas compreendem um grupo estruturalmente diverso de proteínas, encontradas em todos os organismos, que ligam-se a carboidratos funcionando como mediadoras em vários eventos de reconhecimento biológico. As lectinas de Leguminosae mostram considerável identidade e homologia estrutural, mas diferenças em suas especificidades de ligação a carboidratos as tornam alvos atraentes para estudos das relações estrutura-função.

Quimerolectinas são moléculas que possuem além do sítio ligante a açúcar, outro domínio que apresenta atividade biológica diferente. Nesta classe estão as proteínas inativadoras de ribossomos tipo II (RIPs tipo II) que consistem de uma subunidade lectina galactose-específica e uma subunidade inativadora de ribossomos N-glicosidase. Essas proteínas são altamente tóxicas às células de mamíferos e possivelmente estão envolvidas no sistema de defesa vegetal. A clonagem desta quimerolectina permitirá a produção de grandes quantidades de proteína homogênea, possibilitando estudos estruturais e funcionais direcionados ao desenvolvimento de drogas baseados nessas proteínas. Este projeto prevê a clonagem genômica, caracterização e modelagem de uma RIP-II de *Abrus pulchellus*, baseada nas seqüências de isoformas de abrinas de *A. precatorius*, considerando a proximidade filogenética dessas espécies vegetais. A expressão dos domínios toxina e lectina dessa proteína em bactérias, visando a obtenção dos domínios protéicos isolados, também foi proposta.

Resultados: A pulchelina é uma glicoproteína heterodimérica componente do extrato das sementes de *Abrus pulchellus*, classificada como uma proteína inativadora de ribossomo do tipo II (type II ribosome-inactivating protein - RIP II). Objetivando obter proteína pura e homogênea para estudos estruturais e biológicos, o fragmento gênico codante para cadeia B da pulchelina (pulchelin binding chain - PBC) foi amplificado a partir do DNA genômico de *Abrus pulchellus*. A dedução dos oligonucleotídeos foi possível graças a investigação de homologias seqüenciais entre outras cadeias B de RIPs como a da abrina (81%) e da ricina (58%). O produto de amplificação foi inserido no vetor pET28a (Novagen) de forma a expressar somente a cadeia B da pulchelina recombinante (rPBC). A expressão em *E. coli* BL21(DE3) apresentou uma banda adicional de cerca de 30 kDa em SDS-PAGE, expressa como corpos de inclusão. Tais corpos de inclusão foram recuperados e submetidos à solubilização desnaturante num tampão contendo uréia como agente caotrópico. O renovelamento protéico foi conduzido através de repetidos ciclos de diálise contra um tampão de oxidação que apresentava o par redox cisteína-cistina, d-Gal e concentrações decrescentes de uréia. O processo de renovelamento foi monitorado através de medidas de diroísmo circular, sobre espectro de comprimento de onda de 195-250 nm, cromatografia de filtração molecular e ensaios de atividade biológica, que confirmaram a produção da proteína recombinante sob uma forma solúvel e biologicamente ativa.

Título 15: "Viabilização da Produção de Peptídeos Recombinantes de Interesse Biotecnológico em *E.coli*"

Pessoal envolvido:

- Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo – Professora Doutora – FFI/IFSC/USP
- Profa. Dra. Leila Maria Beltraminini – Professora Associada – FFI/IFSC/USP
- Priscila Vasques Castilho – Mestranda - UFSCar
- Derminda Isabel de Moraes – Técnica Especializada – FFI/IFSC/USP
- Gustavo de Campos Molina – Iniciação Científica (sem bolsa) - UFSCar

Agência Financiadora: FAPESP, CNPq.

Objetivos: Este projeto pretende, como objetivo geral, viabilizar a produção de peptídeos referentes a regiões imunoreativas de proteínas do vírus HIV, como as proteínas p24 e gp41, bem como peptídeos de outros organismos de interesse. A produção desses peptídeos em escala permitirá um estudo mais detalhado de suas interações, permitindo o desenho de novos peptídeos que possam atuar por exemplo como inibidores da interação vírus/células alvo.

Resultados: A seqüência codificante do peptídeo p24-3 já foi obtida pela montagem de um fragmento gênico sintético através da Reação em Cadeia da Polimerase. Dois sistemas para expressão usando diferentes proteínas de fusão (tioredoxina e BbCl) foram construídos para expressão em *E.coli*. Ambos possibilitam a purificação por afinidade pela presença de uma cauda de histidinas no produto recombinante, além de um sítio para clivagem reconhecido pela protease fator Xa, a fim de liberar o peptídeo da fusão. Esses dois sistemas foram eficientes na expressão do peptídeo como proteína de fusão, porém diferiram quanto à solubilidade do produto recombinante. Ensaios visando à purificação dos peptídeos recombinantes vêm sendo conduzidos para viabilizar a produção heteróloga como forma alternativa para obtenção de tais peptídeos para sua posterior caracterização estrutural e de sua interação com membranas modelos.

Título 16: "Isolamento Gênico e Produção Heteróloga de Inibidores de Proteinases (BbKI e BbCl) encontrados em sementes de *Bauhinia bauhinioideis*"

Pessoal envolvido:

- Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo – Professora Doutora – FFI/IFSC/USP
- Profa. Dra. Maria Luiza V. Oliva - UNIFESP
- Daiane Hansen – Mestranda - UNIFESP
- Débora Fernanda Vieira – Mestranda – IFSC/USP

Objetivos: Este projeto visa ao isolamento dos genes que codificam os inibidores de proteinase BbCl e BbKI de sementes de *B. bauhinioideis*, já caracterizados com relação à sua estrutura primária protéica.

A clonagem destes genes e consequente expressão heteróloga disponibilizará quantidades necessárias desses inibidores destinadas à caracterização estrutural e utilização em ensaios para o desenvolvimento de novos fármacos.

Publicações

Revistas Internacionais

1. BELTRAMINI, Leila Maria; SOARESCOSTA, A; THIEMAN, Otavio H; SILVA, Flávio Henrique da. A sugarcane crystatin: recombinant expression, purification, and antifungal activity. *Biochemical and Biophysical Research Communications*, San Diego, v. 296, n. 5, p. 1194-1199, 2002.
2. BELTRAMINI, Leila Maria; OLIVEIRA, J T A; MELO, V M M M; CAMARA, M F L; VASCONCELOS, I M; MACHADO, O L T; GOMES, V M; PEREIRA, S P; FERNANDES, C F; NUNES, E P; CAPISTRANO, G G G; MONTEIROMOREIRA, A C O. Purification and physicochemical characterization of a cotyledonary lectin from *Luetzeburgia auriculata*. *Phytochemistry*, Oxford, v. 61, n. 3, p. 301-310, 2002.
3. CAMPANA, P T; MORAES, D I; MONTEIROMOREIRA, A C O; BELTRAMINI, Leila Maria. Refolding of a Tetrameric Lectin assembled by non covalent bonds. *European Journal Of Biochemistry*, v. 269, p. 753-758, 2002.
4. NASCIMENTO, Otaciro Rangel; LOPES, L G F; MIRANDA, J C V; OLIVEIRA, C P; CARVALHO, I M M; BATISTA, A A; ELLENA, J; CASTELLANO, E E; MOREIRA, I S. Crystal structure, electrochemical and spectroscopic properties of the trans-K₂[FeCl(NO POT.0')(cyclam)]-[FeCl(NO POT.+')(cyclam)] IND.2'(P'F IND.6') IND.6'. *J Chem Soc Dalton Trans*, London, n. 9, p. 1903-1906, 2002.
5. PISO, J Sanchez; VAZQUEZ, J A Garcia; ROMERO, J; DURAN, M L; PEDRARES, A Sousa; LABISBAL, E; NASCIMENTO, Otaciro Rangel. Electrochemical synthesis and crystal structures of nickel(II), copper(II), zinc(II) and cadmium(II) complexes with N,N'-bis[(4-methylphenyl) sulfonyl]ethylenediamine. *Inorgânica Chimica Acta*, Lausanne, v. 328, n. 1, p. 111-122, 2002.
6. SANMARTIN, J; BERMEJO, M R; DEIBE, A M Garcia; NASCIMENTO, Otaciro Rangel; LEZAMA, L; ROJO, T. Magnetic properties of a bischelical [4+4+4] trinuclear copper(II) complex. *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions*, Londres, v. 6, p. 1030-1035, 2002.
7. NASCIMENTO, Otaciro Rangel; VINHADO, F S; MARTINS, P R; MASSON, A P; ABREU, D G; VIDOTO, E A; IAMAMOTO, Y. Supported iron(III)porphyrins pentafluorophenyl-derivatives as catalysts in epoxidation reactions by 'H IND.2'O IND.2': the role of the silica-support and sulfonatophenyl residues in the activation of the peroxidic bond. *Journal Of Molecular Catalysis A-Chemical*, Amsterdam, v. 188, n. 1-2, p. 141-151, 2002.
8. ZAMPIERI, Renata Cristina L; POELSITZ, Gustavo Von; BATISTA, Alzir A; NASCIMENTO, Otaciro Rangel; ELLENA, Javier; CASTELLANO, Eduardo E. Syntheses, characterization and X-ray structures of the fac-[RuCl₃(NO)(dppe)] and the trans-[RuCl(NO)(dppe)₂]²⁺ species. *Journal of Inorganic Biochemistry*, v. 92, p. 82-88, 2002.
9. NASCIMENTO, Otaciro Rangel; PEREZLOURIDO, P; ROMERO, J; RODRIGUEZ, L; GARCIAVASQUEZ, J A; CASTRO, J; SOUSA, A; DILWORTH, J R. Synthesis, structure and characterisation of a Mn(IV) complex with a potentially tridentate phosphinothiol ligand. *Inorganic Chemistry Communications*, Amsterdam, v. 5, n. 5, p. 337-339, 2002.
10. NASCIMENTO, Otaciro Rangel; NEVES, A.; ROSSI, L M; BORTOLUZZI, A J; MANGRICH, A S; HAASE, W. Synthesis, structure and properties of a new unsymmetric tetranuclear mixed-valence vanadium (IV/IV) complex containing distinct 'V IND.2'O IND.3 POT.3+' cores. *Inorganic Chemistry Communications*, Amsterdam, v. 5, n. 6, p. 418-421, 2002.

Trabalho de Evento – Internacional

1. CAMPANA, Patrícia Targon; BIANCONI, Maria Lúcia; TONARELLI, Georgina; BELTRAMINI, Leila Maria. Interaction between detergent micelles and the peptide p24 from HIV 1 virus by CD and fluorescence spectroscopies. In: INTER-AMERICAN WORKSHOP ON THE USE OF SYNCHROTRON RADIATION: APPLICATIONS TO MACROMOLECULES AND BIOLOGICAL SYSTEM, 2002, Campinas - SP. Abstracts. 2002. p. 62.

2. TRINDADE, Melissa Barbano; OLIVA, Maria Lucia V; MOREIRA, Ana C de O Monteiro; BELTRAMINI, Leila Maria. Structural characterization of a new chitin-binding lectin, from jack fruit seeds, denoted jachin which induces cell adhesion in vitro. In: INTER-AMERICAN WORKSHOP ON THE USE OF SYNCHROTRON RADIATION: APPLICATIONS TO MACROMOLECULES AND BIOLOGICAL SYSTEM, 2002, Campinas - SP. Abstracts. 2002. p. 46.
3. NAKAHIRA, Marcel; D.I.MORAES; BELTRAMINI, Leila Maria. Structural characterization of coagulation inhibitors purified from *Stryphnodendron barbatiman*. In: INTER-AMERICAN WORKSHOP ON THE USE OF SYNCHROTRON RADIATION: APPLICATIONS TO MACROMOLECULES AND BIOLOGICAL SYSTEM, 2002, Campinas - SP. Abstracts. 2002. p. 47.
4. CAMPANA, P T; BELTRAMINI, Leila Maria. Unfolding and refolding of oligomeric D-Galactose binding lectins: a thermodynamic study. In: SATELLITE MEETING OF THE XIV INTERNATIONAL BIOPHYSICS CONGRESS, 2002, Rio de Janeiro. Hydration forces in protein folding and protein interactions: Osmotic and hydrostatic pressure approaches. 2002.
5. NASCIMENTO, Otaciro Rangel; VIDOTO, E A; MOREIRA, M S M; VINHADO, F S; CIUFFI, K J; IAMAMOTO, Y. Immobilization of 'BETA'halogenated ironporphyrin in the silica matrix by the sol-gel process. In: SYMPOSIUM ON NON-CRYSTALLINE SOLIDS IN BRAZIL, 1/BRAZILIAN SYMPOSIUM ON GLASS AND RELATED MATERIALS, 5, 2001, Foz do Iguaçu. J. Non-Cryst. Solids. 2002. v. 304, p. 151-159.
6. NASCIMENTO, Otaciro Rangel; BIAZZOTTO, J C; VIDOTO, E A; IAMAMOTO, Y; SERRA, A O. Iron(III)-tetra-o-ureaphenylporphyrinosilica obtained by a sol-gel process: a study of EPR, surface area and catalytic activity. In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON NON-CRYSTALLINE SOLIDS IN BRAZIL, 1/BRAZILIAN SYMPOSIUM ON GLASS AND RELATED MATERIALS, 5, 2001, Foz do Iguaçu. J. Non-Cryst. Solids. Anais, 2002. v. 304, p. 101-108.
7. NASCIMENTO, Otaciro Rangel; ELLENA, J; CASTELLANO, E E; LOPES, L G F; OLIVEIRA, C P; SOUZA, E H S; MIRANDA, J C V; BATISTA, A A; MOREIRA, I S. Nitric oxide iron complex with both N^o POT.⁺ and N^o POT.⁰ forms. In: ANNUAL MEETING OF THE AMERICAN CRYSTALLOGRAPHIC ASSOCIATION, 2002, San Antonio. American Crystallographic Association. 2002. p. 53.
8. BORBAT, P P; COSTA FILHO, Antonio Jose da; EARLE, K A; MOSCICKI, J K; FREED, J H. ESR IN STUDIES OF MEMBRANES AND PROTEINS AT ACERT. In: 25TH INTERNATIONAL EPR SYMPOSIUM, 2002, Denver.

Trabalho de Evento – Nacional

1. PINTO, A P A; CAMPANA, P T; BELTRAMINI, Leila Maria; SILBER, A; ARAUJO, A P U. Calflagin: stability and structural studies monitored by CD and fluorescence. In: XXXI REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE BIOQUÍMICA E BIOLOGIA MOLECULAR, 2002, Caxambú. Programa e Resumos. 2002. p. 165-165.
2. SCULACCIO, S A; PINTO, A P A; SILVA, F H; BELTRAMINI, Leila Maria; THIEMANN, O H. Cloning, expression and purification of sugarcane PRPP synthetase. In: XXXI REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE BIOQUÍMICA E BIOLOGIA MOLECULAR, 2002, Caxambú. Programa e Resumos. 2002. p. 188-188.
3. ABEL, Luciano dos Santos; BELTRAMINI, Leila Maria; GARRAT, Richard Charles; JCQ, Carvaho. Desenvolvimento de modelos a serem aplicados no ensino de Biologia Molecular Estrutural. In: VIII ENCONTRO PERSPECTIVAS DO ENSINO DE BIOLOGIA., 2002, São Paulo. 2002.
4. BELTRAMINI, Leila Maria; REIS, R M; MORAES, D I. Estudos espectroscópicos do inibidor de serino-proteases extraído da semente do Falso Barbatimão (*Dimorphandra mollis*). In: X SIMPOSIO INTERNACIONAL DE INICIACAO CIENTIFICA DA UNIVERSIDADE DE SAO PAULO, 2002, Sao Carlos. Resumos. 2002. v. R1003.
5. COSTA, A Soares; BELTRAMINI, Leila Maria; RODRIGUES, E M; THIEMANN, O H; SILVA, Flávio Henrique da. Expression in *E.coli*, purification and initial structural studies of a cystatin from sugarcane. In: XXXI REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE BIOQUÍMICA E BIOLOGIA MOLECULAR, 2002, Caxambú. Programa e Resumos. 2002. p. 108-108.
6. LOPES, J L S; TRINDADE, M B; BELTRAMINI, Leila Maria. Investigação da estrutura secundária de lectina ligante de quitina, extraída das sementes de *Atocarpus integrifolia*, por Dicroísmo Circular e FT-IR. In: X SIMPOSIO INTERNACIONAL DE INICIACAO CIENTIFICA DA UNIVERSIDADE DE SAO PAULO, 2002, São Carlos. Resumos. 2002.
7. ABEL, L D S; CARVALHO, J C Q; GARRAT, R C; BELTRAMINI, Leila Maria. Plastic models representative of nucleic acids and protein structures for the teaching of a structural molecular biology. In: XXXI REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE BIOQUÍMICA E BIOLOGIA MOLECULAR, 2002, Caxambú. Programa e Resumos. 2002. p. 118-118.
8. GOTO, L S; BELTRAMINI, Leila Maria; MORAES, D I; ARAUJO, A P U. Pulchelin, a RIP II from *Abrus pulchellus* seeds: Recombinant expression and refolding of the binding chain. In: XXXI REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE BIOQUÍMICA E BIOLOGIA MOLECULAR, 2002, Caxambú. Programa e Resumos. 2002. p. 164-164.
9. SILVA, A L C; HORTA, A C G; MOREIRA, R A; BELTRAMINI, Leila Maria; ARAUJO, A P U. Synthesis of the lectins from *Abrus pulchellus* in callus culture. In: XXXI REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE BIOQUÍMICA E BIOLOGIA MOLECULAR, 2002, Caxambú. Programa e Resumos. 2002. p. 52-52.
10. NASCIMENTO, Otaciro Rangel; PAULA, Q A; BATISTA, A A; ARAUJO, M P; CASTELLANO, E E; ELLENA, J. Aspectos estruturais em complexos de rutênio contendo o óxido nítrico e nitrilas como ligantes. In: REUNIAO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE QUIMICA, 25, 2002, Poços de Caldas. Livro de Resumos. 2002. p. 145.
11. NASCIMENTO, Otaciro Rangel; ZUCCHI, M R; NANTES, I L; PRIETO, T; FALJONIALARIO, A. Different spin states of ferric cytochrome c induced by membrane interactions: a CW-EPR study of heme iron. In: ENCONTRO NACIONAL DE FISICA DA MATERIA CONDENSADA, 25, 2002, Caxambú. Livro de Resumos SBF. Caxambú: SBF, 2002. p. 71.
12. NASCIMENTO, Otaciro Rangel; WALMSLEY, L.; SOUZA, V P M; CORREA, A A; PEREIRA, E C; BULHÕES, L.o.s.; OLIVEIRA, A J A; ORTIZ, W A. Evidence of magnetic interaction from electron spin resonance measurements in pressed pellets of poly(3-methylthiophene) doped with Cl^o IND.4 POT. In: ENCONTRO NACIONAL DE FISICA DA MATERIA CONDENSADA, 25, 2002, Caxambú. Resumos. Caxambú: SBF, 2002. p. 212-220.
13. NASCIMENTO, Otaciro Rangel; FERNANDEZ, R M; RISKE, K A; LAMY-FREUND, M T. The peculiar DMPG gel-fluid transition monitored by a lipid spin-labeled at the acyl chain end. In: ENCONTRO NACIONAL DE FISICA DA MATERIA CONDENSADA, 25, 2002, Caxambú. Livro de Resumos SBF. 2002. p. 59.
14. ARAÚJO, Maurício Braga de; PINHAL, Nelson Moreira; MAGON, Claudio José; COSTA FILHO, Antonio Jose da; VUGMAN, Ney Vernon. Relaxação spin-rede via processo vibrônico em complexos de níquel por RPE pulsada. In: REUNIÃO ANUAL DA AUREMN, 2002, Maringá. 2002.
15. COSTA FILHO, Antonio Jose da; FREED, Jack H. Two-dimensional Fourier Transform Studies of Dynamics and Structure in Lipid Bilayers. In: XXV ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA, 2002, Caxambu. 2002.
16. GARCIA, W; ARAUJO, Ana Paula Ulian de; TANAKA, M; GARRATT, R C. BRADEION beta: HETEROLOGOUS EXPRESSION AND PURIFICATION. In: XXXI REUNIÃO ANUAL DA SBBQ - SOCIEDADE BRASILEIRA DE BIOQUÍMICA E BIOLOGIA MOLECULAR, 2002, Caxambu. Resumos da XXXI Reunião Anual da SBBQ - Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular. 2002. p. 189-189.
17. PINTO, A P A; CAMPANA, P T; BELTRAMINI, L M; SILBER, A; ARAUJO, Ana Paula Ulian de. CALFLAGIN: STABILITY AND STRUCTURAL STUDIES MONITORED BY CD AND FLUORESCENCE. In: XXXI REUNIÃO ANUAL DA SBBQ - SOCIEDADE BRASILEIRA DE BIOQUÍMICA E BIOLOGIA MOLECULAR, 2002, Caxambu. Resumos da XXXI Reunião Anual da SBBQ - Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular. 2002. p. 165-165.
18. NAVARRO, M; ARAUJO, Ana Paula Ulian de; FOURNIER, D; HOFFMANN, P; GARRATT, R C. CRYSTALLIZATION AND PRELIMINAR STRUCTURAL STUDIES OF THE ENZYME FE-SUPEROXIDE DISMUTASE FROM TRYPANOSOMA CRUZI - Navarro, M; Araújo, A P U; Fournier, D; Hoffmann, P; Garratt, R C - pag. 171. In: XXXI REUNIÃO ANUAL DA SBBQ - SOCIEDADE BRASILEIRA DE BIOQUÍMICA E BIOLOGIA MOLECULAR, Resumos da XXXI Reunião Anual da SBBQ - Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular. 2002. p. 171-171.
19. GOTO, L S; BELTRAMINI, L M; MORAES, D I; ARAUJO, Ana Paula Ulian de. PULCHELIN, A RIP II FROM ABRUS PULCHELLUS SEEDS: RECOMBINANT EXPRESSION AND REFOLDING OF THE BINDING CHAIN. In: XXXI REUNIÃO ANUAL DA SBBQ - SOCIEDADE BRASILEIRA DE BIOQUÍMICA E BIOLOGIA MOLECULAR, 2002, Caxambu. Resumos da XXXI Reunião Anual da SBBQ - Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular. 2002. p. 164-164.
20. SILVA, A L C; HORTA, A C G; MOREIRA, R A; BELTRAMINI, L M; ARAUJO, Ana Paula Ulian de. SYNTHESIS OF THE LECTINS FROM ABRUS PULCHELLUS IN CALLUS CULTURE. In: XXXI REUNIÃO ANUAL DA SBBQ - SOCIEDADE BRASILEIRA DE BIOQUÍMICA E BIOLOGIA MOLECULAR, 2002, Caxambu. Resumos da XXXI Reunião Anual da SBBQ - Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular. 2002. p. 52-52.

Recursos Financeiros – Projetos de Pesquisa

1. FAPESP Proc. nº 98/14138-2, vigência de 01/10/2000 a 30/09/2005, recursos R\$ 699.050,00 – Reserva Técnica R\$ 413.746,36 – Rec.Complementares 160.000,00 – US\$ 1.921.975,18 (para 2 anos) - CEPID/FAPESP - CENTRO DE PESQUISA, INOVAÇÃO E DIFUSÃO — “Center for Structural Molecular Biotechnology- CBME (USP/UFScar/LNLS), onde é Coordenadora de Difusão – Profa. Dra. Leila Maria Beltrami e a Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo é pesquisadora.
2. PRONEX-CNPq: Pesquisadora do projeto intitulado “Núcleo de excelência em biotecnologia molecular estrutural: estrutura, função e aplicações de moléculas de interesse biotecnológico”, sob coordenação do Prof. Dr. Glaucius Oliva Pessoa Física - Proc. 46.6094/2001-9 – de 25/02/2002 a 25/02/2004 – Valor Concedido: R\$ 150.705,14, Pessoa Jurídica – Proc. 66.1193/1997-7 – de 04/10/2000 a 24/11/2003 - Valor Total Concedido: R\$ 368.025,00 – R\$ 150.705,14 (dedução da quota pessoa física) = R\$ 217.319,86 – Profa. Dra. Leila Maria Beltrami.

3. CNPq - Integrado - "Isolamento, Caracterização Biológica, Físico Química e Estrutural de Lectinas de Plantas Superiores: Correlação entre Estrutura e Função". Processo 52258/99-5, março/2002-fev/2004 – Profa. Dra. Leila Maria Beltrami.
4. CNPq - Integrado - "Caracterização Química Espectroscópica e Estrutural de Novas Lectinas Ligantes de Quitina Oriundas de Sementes do Gênero Artocarpus". Processo 521474/96-5, 01/08/2001 a 31/07/2003 – Profa. Dra. Leila Maria Beltrami.
5. Recursos Complementares para Apoio a Grupos de Pesquisa - Pró-Reitoria de Pesquisa - vinculado ao Projeto FINEP no. 193/97 - Outorgado: Prof. Dr. Glaucius Oliva - Proc. nº 2002.1.16664.1.2 - Valor solicitado e concedido: R\$ 3.500,00 para aquisição de R\$ 500,00 - itens de informática e R\$ 3.000,00 – diárias – Profa. Dra. Leila Maria Beltrami.
6. Recursos Complementares para Apoio a Grupos de Pesquisa - Pró-Reitoria de Pesquisa - vinculado ao Projeto FINEP no. 193/97 - Outorgado: Prof. Dr. Glaucius Oliva - Proc. nº 2002.1.16665.1.9 - Valor solicitado e concedido: R\$ 3.500,00 para aquisição de R\$ 1.000,00 - itens de informática e R\$ 2.500,00 – Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo.
7. Recursos Complementares para Apoio a Grupos de Pesquisa - Pró-Reitoria de Pesquisa - vinculado ao Proc. FAPESP no. 1999/07766-0 - Outorgado: Armando Augusto Henriques Vieira - no qual é responsável por sub-projeto - Proc. nº 2002.1.14096.1.7 - Valor solicitado e concedido: R\$ 3.500,00 para aquisição de micro-computador completo (inclusive com impressora e monitor) – Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento.
8. FAPESP, Projeto de Pesquisa Individual: "Clonagem e caracterização de uma quimerolectina de Abrus pulchellus (Leguminosae): expressão de seus domínios", Proc. 99/10607-0 US\$ 24.644,22 + R\$ 17.750,00. Vigência: 02/2000 a 02/2002. Coordenação: Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo.
9. RESERVA TÉCNICA DE PÓS-GRADUAÇÃO, Doutorado PATRÍCIA TARGON CAMPANA, Coordenadora LEILA MARIA BELTRAMINI, Agência financiadora: FAPESP - Processo nº 1998/02512-7 - Duração: 01/05/1998 a 30/04/2002. Valor concedido R\$ 22.101,55.
10. RESERVA TÉCNICA DE PÓS-GRADUAÇÃO, Doutorado ALESSANDRA RIPOSATI ARANTES, Coordenador OTACIRO RANGEL NASCIMENTO, Agência financiadora: FAPESP - Processo nº 2002/00841-0 - Duração: 01/04/2002 a 31/05/2005. Valor concedido R\$ 5.148,00.

Bolsas Produtividade em Pesquisa

1. Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento, Nível I-B, ago/00 a jul/03, CNPq.
2. Profa. Dra. Leila Maria Beltrami, Nível II-A, ago/01 a jul/03, CNPq.

D. Atividades Acadêmicas e de Extensão Universitária

Atividades Didáticas

Graduação

-  **Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo**
 1. SLC553 BIOLOGIA II (Teórica, Anual, 120 h)
-  **Profa. Dra. Leila Maria Beltrami**
 1. SLC547 BIOLOGIA I (Teórica, Anual, 120 h)
 2. SLC567 PRÁTICA DE ENSINO DE CIÊNCIAS DO 1º GRAU (Teórica, Semestral, 60 h)
 3. FFI139 BIOFÍSICA I (Teórica, Semestral, 45h)
-  **Prof. Dr. Antonio José da Costa Filho**
 1. FCM102 FÍSICA II (Teórica, Semestral, 90 h)
 2. FCM101 FÍSICA I (Teórica, Semestral, 90h)

Orientação Acadêmica e Bolsistas

Aperfeiçoamento (Treinamento Técnico Alunos Graduação)

-  **Profa. Dra. Leila Maria Beltrami**
 1. Assuero Faria Garcia, Treinamento Técnico junto aos Laboratórios de Biofísica Molecular e Espectroscopia e Cristalografia e Modelagem Molecular de Proteínas, PRP/USP, 04/07/2002 a 03/07/2003.
 2. Júlio César Queiroz de Carvalho, Treinamento Técnico junto ao Centro de Biotecnologia Molecular Estrutural, PRP/USP, 01/04/2001 a 02/04/2004.
 3. Rosimeiri Galbiati, "Treinamento em técnicas de Bioquímica, Biofísica e Biologia Molecular, junto ao Grupo de Biofísica Molecular e Espectroscopia do IFSC", PRP/USP, 2001 a 2002.

Pós-Doutoramento

-  **Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento**
 1. Cristina Souza Freire Nordi, "Estudos dos processos de permeabilidade de transporte de moléculas e íons através de cápsulas e bainhas mucilaginosas de microalgas de água doce, utilizando a técnica de ressonância paramagnética", FAPESP, 01/05/2001 a 30/04/2003.
-  **Profa. Dra. Leila Maria Beltrami**
 1. Neusa Fernandes dos Santos, "O impacto social da biologia molecular e da biotecnologia, e o papel da educação e difusão nesta área do conhecimento", FAPESP, 01/01/02 a 31/12/2003.
 2. Patrícia Targon Campana, "Interações entre seqüências de proteínas virais com vesículas artificiais estudadas por técnicas espectroscópicas", FAPESP, 01/07/2002 a 30/06/2003.

Doutoramento

-  **Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento**
 1. Queite Antonio de Paula. (Co-orientador) "Estudo da Reatividade do Complexo [NH₄]⁺[RuCl₄(DMSO)₂] com Ligantes N- heterocíclicos, Solventes Coordenados, NO e Aminoácidos", CNPq, 1999 a 2003.
 2. Edi Junior Pelicon, "Estudos das propriedades paramagnéticas do monocrystal do composto dimérico Cu₂[TzTs]₄ através da técnicas de ressonância paramagnética eletrônica em bandas X e Q", CNPq, 04/2001 a 03/2002 (desistente)
 3. Alessandra Arantes Ripsati, "Um estudo comparativo por RPE CW e pulsado entre citocromo C e microperoxidases com ion ferrico no estado de spin baixo", FAPESP, 01/04/2002 a 31/03/2005.
-  **Profa. Dra. Leila Maria Beltrami**
 1. Cecília Sulzbacher Caruso, "Caracterização estrutural da adenina fosforibosil transferase (APRT) de leishmania, expressa em e.coli por métodos espectroscópicos", CAPES (jan a ago/98) e FAPESP (1998 a 2002).
 2. Patrícia Targon Campana, "Estudos sobre o processo de reenovelamento da frutalina, uma lectina oligomérica ligante de D-galactose", FAPESP (1998 a 2002).
 3. Melissa Barbo Trindade. "Purificação e caracterização físico-química, estrutural e espectroscopia de lectinas ligantes de quitina isoladas de sementes de gênero artocarpus", CAPES, 01/09/2000 a 31/08/2004.
 4. André Luis Coelho da Silva, "Expressão Heteróloga e Caracterização do Domínio Toxina da Pulchellina: uma RIP-II", CNPq, 06/04/2001 a 05/04/2005.
 5. Ana Cristina Monteiro Moreira – "Caracterização estrutural de três lectinas apresentando especificidades distintas, presente em sementes da fruta-pão (Artocarpus incisa L.)" – Universidade Federal do Ceará – (co-orientadora)
-  **Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo**
 1. Leandro Seiji Goto, "Caracterização das propriedades biomoleculares da cadeia B da Pulchellina recombinante", CAPES, 01/06/2002 a 31/05/2003.

Mestrado

-  **Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo**

1. Andressa Patrícia Alves Pinto, "Expressão, caracterização e estudos estruturais em F29: uma proteína fragelar cálcio-ligante de Trypanosoma cruzi", 01/02/2000 a 31/01/2004.
2. Anemari Ramos Dinarte dos Santos, "Clonagem genômica e caracterização do gene de uma lectina de semente de abrus pulchellus", FAPESP, PPGGEV/UFSCar, (1999 a 2002).
3. Leandro Seiji Goto, "Subclonagem, expressão e caracterização da cadeia B de pulchellina, uma proteína RIP-II", CAPES, 01/02/2000 a 28/02/2002.
4. Débora Fernanda Vieira, "Estudos Estruturais de uma Glutathione S-Transferase (Classe Omega) Recombinante de Schistosoma mansoni", CNPq, 01/03/2002 a 28/02/2004.
5. Priscila Vasques Castilho, "Viabilização da produção de peptídeos recombinantes de interesse biotecnológico em E.coli", CNPq, 01/06/2002 a 31/05/2004.

Profa. Dra. Leila Maria Beltrami

1. Marli Leite de Moraes, "Interação de seqüências peptídicas da Proteína P-24 do HIV com monocamadas de lipídeos (DPCG e DPPC)", CAPES, 01/10/2001 a 30/09/2003.
2. Marcel Nakahira, "Isolamento, Purificação e Sequência Primária de uma Proteínas com Atividade Anticoagulante Extraída da Sementes de Barbatimão (Stryphnodendron barbatiman)", CAPES, 01/09/2002 a 31/03/2004.

Prof. Dr. Antonio José da Costa Filho

1. Marco Antonio Leite, "Estudos Estruturais por Ressonância Magnética Eletrônica de Lectinas ligantes de Manganês", CAPES, 01/09/2002 a 31/03/2004.
2. Ernani Damião Vieira, "Complexos de Cobre-Dipeptídeo como Sistemas Modelo para Interações Moleculares de Interesse Biológico: Estudos por Ressonância Paramagnética Eletrônica", CNPq, 03/2002 a 02/2004.

Iniciação Científica

Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento

1. Glaucia Guimarães Pereira, "Estudos de metaloporfirinas através das técnicas espectroscópicas EPR-CW e pulsado", FAPESP, 2000 a 2002.

Profa. Dra. Leila Maria Beltrami

1. José Luiz Souza Lopes, "Investigação da estrutura secundária de uma lectina ligante de quitina, extraída das sementes de 'artocarpus integrifolia', por difração circular de FT-IR", FAPESP, 01/09/2001 a 31/08/2003.
2. Fabiana Cristina Vila, "Extração de lectinas da semente de Artocarpus incisa", CNPq, 01/01/2002 a 31/07/2003.
3. Talles Henrique G de Oliveira, "Descrevendo a confecção de modelos especiais representando os ácidos nucleicos: fundamentos básicos numa linguagem voltada ao ensino médio", FAPESP, 01/09/2002 a 31/08/2003.
4. Elisângela Matias Miranda, "Extração de lectinas das sementes de Integrifolia e Incisa e Cromatografia de afinidade", CNPq, 01/06/2002 a 28/02/2004
5. Rafael Machado Reis, "Substância anticoagulante, com caráter protéico, presente na semente de Falso Barbatimão (Dimorphandra mollis): purificação e caracterização", CNPq, 2001 a 2002.

Prof. Dr. Antonio José da Costa Filho

1. Ana Paula Citadini, "Estrutura Dinâmica de Membranas de Interesse Biológico: A Transição da Fase Lamelar para Hexagonal Inversa", CNPq, 01/07/2002 a 30/06/2003.

Orientações de Outra Natureza

Prof. Dr. Antonio José da Costa Filho

1. RIBEIRO, Ronny Rocha. Monitoria voluntária junto à disciplina FCM 102 Física II ministrada ao Bacharelado em Física. 2002.
2. BEBEACHIBULI, Aida. Monitoria junto à disciplina FCM 101 Física I ministrada ao curso de Bacharelado em Física do IFSC/USP. 2002. Programa de Aperfeiçoamento de Ensino. Orientador: Antonio Jose da Costa Filho.

Teses e Dissertações Concluídas por Docentes e Alunos

Doutoramento

Profa. Dra. Leila Maria Beltrami

1. Cecília Sulzbacher Caruso, "Caracterização estrutural da adenina fosforibosil transferase (APRT) de Leishmania, expressa em E.coli por métodos espectroscópicos", CAPES (jan a agos/98) FAPESP (1998 a 2002), 23/09/2002.
2. Patrícia Targon Campana, "Estudos sobre o processo de reenovelamento da frutalina, uma lectina oligomérica ligante de D-galactose", FAPESP, 30/04/2002.

Mestrado

Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo

1. Andressa Patrícia Alves Pinto, "Expressão, caracterização e estudos estruturais em F29: uma proteína fragelar cálcio-ligante de Trypanosoma cruzi", 21/11/2002.
2. Anemari Ramos Dinarte dos Santos, "Clonagem genômica e caracterização do gene de uma lectina de semente de abrus pulchellus", FAPESP, PPGGEV/UFSCar, 21/03/2002
3. Leandro Seiji Goto, "Subclonagem, expressão e caracterização da cadeia B de pulchellina, uma proteína RIP-II", CAPES, 27/05/2002.

Participação em Comissões Julgadoras no IFSC

Comissão de Seleção/ Examinadora para Processo Seletivo

Profa.Dra..Leila Maria Beltrami

1. Membro titular em comissão Examinadora do Processo Seletivo de provas para contratação de um professor Doutor, MS-3, em RTP junto ao Depto. de Física e Informática do Instituto de Física de São Carlos, para ministrar aulas no curso de Licenciatura em Ciências Exatas

Exame de Qualificação

Prof. Dr. Antonio José da Costa Filho

1. Caio Eduardo de Campos Tambelli, "7Li and 133Cs spin-lattice relaxation in a nonlinear optical crystal CsLiB6O10".
2. Antonio Carlos Bloise Jr., "Spin-lattice relaxation enhancement in liquid gallium confined within nanoporous matrices".

Tese de Doutorado

Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo

1. Patrícia Targon Campana, "Desnaturação e renovelamento de lectinas oligoméricas ligantes de D-galactose: estudos no equilíbrio termodinâmico".

Profa. Dra. Leila Maria Beltrami

1. Cecília Sulzbacher Caruso, "Interferência de peptídeos contendo histidinas na estrutura de proteínas recombinantes: um estudo aplicado à adenina fosforibosil transferase (APRT) de Leishmania tarentolae".
1. Patrícia Targon Campana, "Desnaturação e renovelamento de lectinas oligoméricas ligantes de D-galactose: estudos no equilíbrio termodinâmico".

Dissertação de Mestrado

Profa. Dra. Leila Maria Beltrami

1. Antonio Joaquim da Silva Neto, "Expressão, Purificação e Modelagem Molecular da Proteína SmRho de Schistosoma mansoni".

Prof. Dr. Antonio José da Costa Filho

1. Ronny Rocha Ribeiro, "Espectroscopia de Ressonância Paramagnética Eletrônica de onda contínua e pulsada em Poli(o-metoxianilina)".

Participação em Comissões Julgadoras Externas ao IFSC

Tese de Doutorado

Profa. Dra. Leila Maria Beltrami

1. Ana Cristina de Oliveira Monteiro Moreira, "Caracterização estrutural de três lectinas apresentando especificidades distintas, presente em sementes da fruta-pão (Artocarpus incisa L.)". Tese (Doutorado em Bioquímica) - Universidade Federal do Ceará.

- Gisele Eliane Perissuti, "Galactomanana de Mimosa scabrella Benthana e proteínas do leite: Análise da interação entre os biopolímeros". Tese (Doutorado em Ciências (Bioquímica)) - Universidade Federal do Paraná.
- Ricardo de Oliveira Tavares, "Sementes de Dioclea sclerocarpa Ducke: Um sistema endógeno lectina-receptor". Tese (Doutorado em Bioquímica) - Universidade Federal do Ceará.
- Sônia Duarte Figueiró, "Filmes de galactomanana-colágeno: caracterização físico-química e uso na detecção de lectinas". 2002. Tese (Doutorado em Bioquímica) - Universidade Federal do Ceará.



Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo

- Monica Rosas da Costa lemma, "Metalloproteases-desintegrinas de venenos de serpente: purificação, expressão heteróloga e interação com a integrina $\alpha 2 \beta 1$ ". Tese (Doutorado em Ciências Fisiológicas) - Universidade Federal de São Carlos.
- Sandra Cristina Pfister, "Localização intracelular de variantes da DSCR1 - uma proteína relacionada com a síndrome de Down". Tese (Doutorado em Ciências Fisiológicas) - Universidade Federal de São Carlos.

Dissertação de Mestrado



Profa. Dra. Leila Maria Beltrami

- Daniilo Trindade De Azavedo, "As provas do tipo vestibular e a LDB/96. O caso da Biologia". Dissertação (Mestrado em Bioquímica) - Universidade Federal do Rio de Janeiro.
- LEANDRO SEIJI GOTO - Clonagem, Expressão Purificação e Renovelamento da Cadeia B da Pulchellina, uma RIP-II de *Abrus pulchellus*. Dissertação (Mestrado em Genética e Evolução) - Universidade Federal de São Carlos.



Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo

- Anemari Ramos Dinarte dos Santos, "Clonagem genômica e expressão do domínio toxina de uma RIP 2 de *Abrus pulchellus*". Dissertação (Mestrado em Genética e Evolução) - Universidade Federal de São Carlos.
- Camilo Del Cistia Andrade, "Expressão Heteróloga, purificação e ensaios de cristalização da DSCR1: Uma proteína envolvida com a Síndrome de Down". Dissertação (Mestrado em Genética e Evolução) - Universidade Federal de São Carlos.
- Humberto Rodrigues Perez, "HrcA de *Caulobacter crescentus* e Xylella fastidiosa: Estudos Comparativos de Sequências e Desenvolvimento de Modelo Estrutural". Dissertação (Mestrado em Bioquímica) - Instituto de Química.
- Leandro Seiji Goto, "Clonagem, Expressão Purificação e Renovelamento da Cadeia B da Pulchellina, uma PIP-II de *Abrus pulchellus*". 2002. Dissertação (Mestrado em Genética e Evolução) - Universidade Federal de São Carlos.
- Luis Lamberti Pinto da Silva, "Isolamento, caracterização e expressão heteróloga do cDNA da lectina KM+ de *Artocarpus integrifolia*". Dissertação (Mestrado em Ciências Farmacêuticas [Rib. Preto]) - Universidade de São Paulo.
- Mariana Beatriz Braga Machado, "QTLs do cromossomo 5 afetando peso corporal em bovinos da raça Canchim". 2002. Dissertação (Mestrado em Genética e Evolução) - Universidade Federal de São Carlos.
- Tatiana da Costa Jansen, "Isolamento e identificação de bactérias endofíticas de plantas do gênero *Maytenus* (espinheira - santa)". Dissertação (Mestrado em Ciências Fisiológicas) - Universidade Federal de São Carlos.

Exame de Qualificação



Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo

- Roberto Mário Machado Verzola, "Métodos de análise da expressão gênica". Exame de qualificação (Doutorando em Ciências Fisiológicas) - Universidade Federal de São Carlos.

Assessoria no Julgamento e Avaliação de Projetos



Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento

Assessoria FAPESP - 04 pareceres.
Assessoria CNPq - 02 pareceres.
Assessoria Fundação Araucária - Paraná - 02 pareceres



Profa. Dra. Leila Maria Beltrami

Assessoria FAPESP - 01 pareceres.
Assessoria CNPq - 01 pareceres.

Entrevistas Concedidas



Profa. Dra. Leila Maria Beltrami

- "Um labirinto de 12 mil metros quadrados. Nele vive a pesquisa". O Estado de São Paulo, São Paulo, p. A12. 17 mar. 2002
- "Um marco histórico para a expansão das pesquisas". Revista Pesquisa Fapesp, São Paulo, v. 72, p. 7-8, 2002.

Representação e Participação em Comissões no IFSC



Profa. Dra. Leila Maria Beltrami

- Representante Titular Categoria Associado - Conselho Depto Física e Informática, 9/2002 - Atual
- Representante Suplente da Categoria Professor Associado na Congregação, 10/2002 - Atual
- Membro Titular da CIBio (Comissão Interna de Biossegurança) do IFSC, desde abril de 1997.
- Representante Suplente Categoria CoCEX - CTA, 9/2001 - Atual
- Coordenadora do Grupo de Biofísica Molecular e Espectroscopia do Depto. de Física e Informática, 1/1998 - Atual
- Coordenadora de Difusão do Centro de Biotecnologia Molecular e Estrutura - CBME, CEPID/FAPESP - Encargo, 10/2000 - Atual



Profa. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo

- Presidente da CIBio (Comissão Interna de Biossegurança) do IFSC, desde abril de 1997.
- Representante Membro Suplente - Conselho CDCC, 8/2002 - Atual
- Coordenadora das disciplinas de Biologia, 2/2002 - Atual
- Representante Suplente Categoria Doutor - Conselho do Depto. Física e Informática, 10/2002 - Atual
- Representante Titular Categoria Doutor - Conselho do Depto. Física e Informática. 9/2000 - 9/2002



Prof. Dr. Antonio José da Costa Filho

- Representante Titular Categoria Prof Doutor MS3 junto ao Conselho Departamental, 9/2002 - Atual
- Representante Titular Categoria Prof Assistente MS2 junto à Congregação, 7/2001 - 11/2002

Representação e Participação em Comissões Externas ao IFSC



Profa. Dra. Leila Maria Beltrami

- Secretária Executiva do IEA, 1/2002 - Atual
- Representante do IFSC junto a Pro Reitoria de cultura e Extensão USP, desde 2001
- Representante do IFSC junto a CoC - Comissão de Coordenação do Curso de Licenciatura em Ciências Exatas/USP, S.Carlos, 12/2001 - Atual
- Membro da Comissão para Analisar e Propor Novos Procedimentos Relacionados ao funcionamento do SISUSP - Sistema Integrado de Saúde/USP, no "Campus" de São Carlos, Portaria PCASC - 31/2001, de 05/10/2001 - Atual
- Representante Suplente Categoria no Conselho do CDCC, 5/2000 - 5/2002

Prof. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo

1. Representante Titular da CIBio (Comissão Interna de Biossegurança) da Universidade Federal de São Carlos (UFSCar).
2. Orientadora credenciada no Programa de Pós-graduação em Genética e Evolução (PPGGEV) da UFSCar desde setembro de 1999.
3. Representante Membro Titular - Conselho CDCC, 5/2000 - 5/2002

Promoção e Organização de Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais**Outros****Prof. Dra. Leila Maria Beltrami**

1. Curso intitulado: "Noções sobre estrutura e funções do DNA".
2. Curso intitulado: "Teoria e prática da Biologia Molecular e da Biotecnologia"
3. 02 oficinas com kit de fermentação e respiração celular, destinado a atualização de alunos do Ensino Médio
4. Apresentação, discussão e estimulação do censo crítico dos alunos do ensino médio através do filme GATTACA.
5. Curso intitulado: "Teoria e prática da biologia molecular e da biotecnologia: implicações éticas, sociais e econômicas", CBME e IEA-São Carlos, destinado a professores Ensino Médio.
6. Apresentação do software "A célula virtual" os principais componentes da célula e a base molecular de suas funções, CBME, destinados professores Ensino Médio.
7. Mini-cursos: Modele sua proteína, utilizando os discos giratórios e as peças desenvolvidas pelo CBME
8. Os principais componentes da célula e a base molecular de suas funções, no curso: Teoria e prática da biologia molecular e da biotecnologia: implicações éticas, sociais e econômicas.

Prof. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo

1. Teoria e prática da Biologia Molecular e da Biotecnologia: implicações éticas, sociais e econômicas. 2002. (Curso de curta duração ministrado/Extensão).

Participação em Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais**Congresso Internacional****Prof. Dra. Leila Maria Beltrami**

1. Satellite Meeting of the XIV International Biophysics Congress – Rio de Janeiro, RJ.
2. X Simpósio Internacional de Iniciação Científica da Universidade de São Paulo – São Carlos, SP.
3. Inter-American Workshop on the use of Synchrotron Radiation: Applications to Macromolecules and Biological System – Campinas, SP.
4. IX Congresso Internacional de Educação a Distância.

Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento

1. XIV International Biophysics Congress, de 27 de abril a 01 de maio de 2002, Buenos Aires, Argentina.

Congresso Nacional**Prof. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo**

1. XXXI Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular – Caxambu, MG.

Prof. Dra. Leila Maria Beltrami

1. XXXI Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular – Caxambu, MG, inclusive com a montagem de um show-room sobre o Ensino de Bioquímica no Brasil.
2. VIII Encontro Perspectivas do Ensino de Biologia – São Paulo, SP.
3. Aula inaugural do Instituto de Estudos Avançados da Universidade de São Paulo em São Carlos.
4. Mesa Temática: Proteínas, palestra - Por trás da estrutura/função de proteínas e peptídeos.
5. Mini-cursos: Modele sua proteína, utilizando os discos giratórios e as peças desenvolvidas pelo CBME.
6. Os principais componentes da célula e a base molecular de suas funções, no curso: Teoria e prática da biologia molecular e da biotecnologia: implicações éticas, sociais e econômicas.
7. Seminários de Cultura e Extensão.

Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento

1. IX Reunião Brasileira de Ficologia – de 2 a 6 de março/2002. Santa Cruz, Aracruz – ES.

Cristalografia

ÍNDICE

A. PRINCIPAIS INDICADORES DE DESEMPENHO E OUTROS DADOS RELEVANTES 56

B. PRÊMIOS E DISTINÇÕES	57
C. ATIVIDADES DE PESQUISA	57
<i>Recursos Humanos</i>	59
<i>Linhas de Pesquisa</i>	62
<i>Publicações</i>	69
<i>Recursos Financeiros – Projetos de Pesquisa</i>	82
<i>Bolsas Produtividade em Pesquisa</i>	85
D. ATIVIDADES ACADÊMICAS E DE EXTENSÃO UNIVERSITÁRIA	86
<i>Atividades Didáticas</i>	86
<i>Orientação Acadêmica e Bolsistas</i>	87
<i>Teses e Dissertações Concluídas por Docentes e Alunos</i>	93
<i>Participação em Comissões Julgadoras no IFSC</i>	93
<i>Participação em Comissões Julgadoras Externas ao IFSC</i>	95
<i>Assessoria no Julgamento e Avaliação de Projetos</i>	98
<i>Consultoria</i>	99
<i>Serviços à Comunidade</i>	99
<i>Entrevistas Concedidas</i>	101
<i>Responsabilidade de Docentes do FFI no Setor de Infra-Estrutura do IFSC</i>	101
<i>Representação e Participação em Comissões no IFSC</i>	101
<i>Representação e Participação em Comissões Externas ao IFSC</i>	101
<i>Encargos Administrativos</i>	102
<i>Promoção e Organização de Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais</i>	102
<i>Participação em Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais</i>	112
<i>Cursos Frequentados</i>	114
<i>Acordos e Protocolos de Cooperação Científica com outras Instituições</i>	115
<i>Patentes</i>	115

Grupo de Pesquisa: CRISTALOGRAFIA**A. Principais Indicadores de Desempenho e Outros Dados Relevantes**

O Grupo de Cristalografia prosseguiu com suas atividades de pesquisa, ensino e extensão, nas áreas de Cristalografia Estrutural, Cristalografia em Ciência dos Materiais, Cristalografia de Proteínas, Modelagem Molecular, Biologia Molecular e Planejamento Racional de Fármacos e Vacinas. O grupo caracteriza-se pela sua ótima produtividade científica, grande envolvimento na formação de mestres e doutores, excelentes níveis de captação de recursos junto às agências de fomento e o desenvolvimento de projetos de inovação tecnológica em parceria com empresas.

Os principais indicadores da produtividade do grupo estão sumarizados na tabela a seguir:

Trabalhos publicados em periódicos indexados	52
Resumos em congressos internacionais	29
Resumos em congressos nacionais	69
Doutorados concluídos no ano de 2002	2
Mestrados concluídos no ano de 2002	5
Pós-doutorados que trabalharam no grupo em 2002	13
Doutorados em andamento orientados por docentes do grupo	29
Mestrados em andamento orientados por docentes do grupo	9
Alunos de Iniciação Científica orientados por docentes do grupo em 2002	15
Projetos de pesquisa apoiados com recursos financeiros em andamento em 2002	59
Numero de docentes do grupo	7
Numero de técnicos de nível superior do grupo	3
Número de técnicos de nível médio do grupo	2

No ano de 2002 continuou-se o projeto do Centro de Biotecnologia Molecular Estrutural, um dos CEPIDs da FAPESP (Centros de Pesquisa, Inovação e Difusão), com diversos projetos de pesquisa e atividades de divulgação. Uma das atividades relacionadas à difusão gerou como produto kits de modelos moleculares de proteínas, com patente depositada.

Na área de Cristalografia Estrutural, liderada pelo Prof. Eduardo Ernesto Castellano, destaca-se a obtenção de um projeto de pesquisa com financiamento internacional, pela Comunidade Européia, pelo período de 3 anos. Também nesta área foi contratado um novo docente, Dr. Javier Ellena, por processo seletivo.

A área de Ciência dos Materiais continua a ser liderada pela Profa. Yvonne P. Mascarenhas, que continua com diversas atividades de pesquisa, mesmo com a aposentadoria compulsória.

B. Prêmios e Distinções

Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, Paraninfo da VII turma de formandos do curso de licenciatura em Ciências Exatas, Interunidades IFSC-IQSC-ICMC, no anfitrião de Convenções da EESC/USP, São Carlos, SP, 14/12/02.

C. Atividades de Pesquisa**Cristalografia Estrutural:**

Os resultados de pesquisa decorrentes da utilização do moderno difratômetro de raios-X com detector tipo CCD, instalado a cerca de dois anos como resultado de um projeto temático da FAPESP coordenado pelo Prof. Castellano, continuam sendo excelentes, com cerca de 300 estruturas sendo medidas e determinadas por ano. Destacam-se os trabalhos com as estruturas dos calixarenos e

também os estudos de complexos organometálicos centrados na química do Rutenio, com potenciais aplicações tecnológicas e médicas.

Cristalografia de Proteínas:

Na área de Cristalografia de Proteínas e Biologia Estrutural, os principais temas de estudo e seu progresso estão sumarizados no quadro abaixo:

X    Etapas concluídas
Início imediato
em anos anteriores

Etapas concluídas Etapas em andamento

		Pesq. Respons.I	Clonagem	Expressão	Purificação	Estudos Funcionais	Cristalização	Difração	Estrutura Cristalográfica	Modelagem	Co- cristalização	Espectroscop CD/RMN/Fluc
	Infectious Diseases											
1	<i>T. cruzi</i> – Glyceroldehyde-3-fosfate dehydrogenase	GO	X	X	X	X	X	X	X	X		
2	<i>T. cruzi</i> – Transialidase	GO	X	X	X		X					
3	<i>T. cruzi</i> – Phosphoenol-pyruvate-carboxykinase	GO	X	X	X	X	X	X	X			
4	<i>T. cruzi</i> – Pyruvate-phosphate-dikinase	OT	X	X	X							
5	<i>T. cruzi</i> – Rho1 GTPase	OT	X	X	X							
6	<i>T. cruzi</i> – Fe Superoxide dismutase	RG	X	X	X							
7	<i>Rhodnius prolixus</i> heme binding protein	IP			X		X	X				
8	<i>T. brucei</i> – Phosphoglucose isomerase (PGI)	OT	X	X	X	X				X		
9	<i>T. brucei</i> – Enolase	RG	X	X								
10	<i>Leishmania</i> – Phosphoglucose isomerase (PGI)	OT	X	X	X	X						
11	<i>Leishmania</i> – Adenine phosphorybosil transferase	OT	X	X	X	X	X	X	X			
12	<i>Leishmania</i> – Hypoxanthine-G-p- transferase	OT	X	X	X	X	X	X				
13	<i>Leishmania</i> – Xanthine-p-transferase	OT	X									
14	<i>Leishmania</i> – Adenylosuccinate lyase	OT	X	X	X							
15	<i>Leishmania</i> – Adenylosuccinate synthetase	OT	X	X								
16	<i>Leishmania</i> – AMP deaminase	OT	X									
17	<i>Leishmania</i> – Trp-tRNA-aminoacyl-transferase2	OT	X									
18	<i>Leishmania</i> – Arginase	OT										
19	<i>P. falciparum</i> – Adenylosuccinate lyase	OT	X	X	X							
20	<i>P. falciparum</i> – Fe Superoxide Dismutase	RG										
21	<i>S. mansoni</i> – Purine nucleoside phosphorylase	RG	X	X	X	X	X	X	X	X		
22	<i>S. mansoni</i> – SM14	RG	X	X	X					X		
23	<i>S. mansoni</i> – Superoxide Dismutase	RG	X	X	X	X	X	X	X	X		
24	<i>S. mansoni</i> – small GTPase, SmRho	RG	X	X								
25	<i>Salmonella typhi</i> dehydroquinase (DHQ)	IP										
26	Y.fever virus-NS3-helicase/triPase domain	RG	X	X						X		
27	Human papilloma virus-protein E2	IP	X	X	X		X	X	X			
	Other Proteins in Human Health											
28	<i>Human</i> – Adenine phosphorybosil transferase	OT	X	X	X							
29	<i>Human</i> Bradeion-β rectal cancer marker protein	RG	X									
30	<i>Human</i> C-peptide from pro-insulin	RG	X	X	X				X			
31	<i>Human</i> Interleukin-224	IP										
32	<i>Human</i> – Glucose-6-phosphate isomerase	OT	X	X	X	X	X	X	X			
33	<i>Human</i> – Trp-tRNA-aminoacyl-transferase2	OT	X	X								
34	<i>Human</i> – PRPP synthetase I (PRS-I)	OT/GO	X	X	X							
35	<i>Human</i> – PRPP synthetase II (PRS-II)	OT/GO	X	X								
36	<i>Human</i> – PAP39	OT	X									
37	<i>Human</i> – PAP41	OT	X									
38	<i>Human</i> – Thyroid hormone receptor (TR)	IP	X	X	X							
39	<i>Human</i> – Retinoic acid X receptor (RXR)	IP	X									
40	<i>A. c. latincinctus</i> - Phospholipase A2 -	DH					X	X	X			
41	<i>B. jararaca</i> - Metalloproteinas/disintegrin	DH					X	X	X			X
42	L-aminoacid oxydase from the <i>A. c. latincinctus</i>	DH			X		X					
43	D49 PLA2 piratoxin III from <i>B. prajai</i>	IP										
	Proteins of Biotech. Interest and Basic Research											
44	<i>GumC</i> from <i>Xylella fastidiosa</i>	DH/GO	X	X								X
45	<i>GumD</i> from <i>Xylella fastidiosa</i>	DH/GO	X	X								X
46	<i>GumH</i> from <i>Xylella fastidiosa</i>	DH/GO	X	X								
47	<i>GumM</i> from <i>Xylella fastidiosa</i>	DH/GO										
48	Other <i>Gum</i> proteins from <i>Xylella fastidiosa</i>	DH/GO	X									
49	Lectins of Leguminosae (<i>Cratylia mollis</i>)	GO/RG			X		X	X				
50	<i>Copaifera Langsdorffii</i> – Trypsin inhibitor	IP					X	X				
51	<i>E. contortisiliquum</i> – Trypsin inhibitor	RG			X		X	X	X			

52	Sugarcane – PRPP synthetase I (PRS-I)	OT	X	X	X							
53	Crystallization of Bean Rugose Mosaic Virus	OT			X							
54	Arabidopsis thaliana Protein thi-1	GO	X	X	X		X	X				
55	Rabbit – Triosephosphate isomerase	IP					X	X				
56	Trichoderma reesei - □-Xylosidase	IP			X		X	X				
57	Penicillium sp. - □-Galactosidase	IP			X		X	X				
58	Trichoderma reesei - □-Manosidase	IP										
59	E.coli N-acetyl-glucosamine 6-P deacetylase	GO	X	X	X		X					

Estes projetos demonstram a abrangência das pesquisas em estudos estruturais e planejamento de fármacos e vacinas. Um aspecto importante no grupo tem sido a profícua colaboração em pesquisa com químicos de síntese e produtos naturais, que tem resultado na obtenção de várias substâncias inovadoras, com marcante atividade inibitória de enzimas de parasitas, potenciais novos fármacos para o tratamento destas doenças.

Destacamos também, no ano de 2002, a continuidade do projeto desenvolvido em colaboração com uma empresa farmacêutica nacional (Eurofarma Laboratórios Ltda), com a clonagem dos genes codantes das enzimas COX-1 e COX-2 e o desenvolvimento de inibidores específicos da COX-2, potenciais novos fármacos anti-inflamatórios.

Observa-se também a maior preocupação com a proteção à propriedade intelectual, com a submissão de várias patentes, algumas delas de abrangência internacional.

Cristalografia em Ciência dos Materiais:

As atividades desenvolvidas em Cristalografia aplicada a Ciência dos Materiais são decorrentes de dois projetos ainda em andamento respectivamente "Aplicação de Raios X e Neutrons em Materiais Zeolíticos, Cerâmicos Ferroelétricos e solos Expansivos" do PADCT/CNPq, sob coordenação de Yvonne Primerano Mascarenhas e "Materiais Ferroelétricos: Fenomenologia, Propriedades e Caracterização", projeto temático financiado pela FAPESP, coordenador José Antonio Eiras (UFSCar) com Yvonne Primerano Mascarenhas como um dos pesquisadores principais. Outras colaborações foram realizadas com pesquisadores de outras instituições:

- J.C. Fernandes do Departamento de Física da UFF – Materiais magnéticos;
- M. Abate do Departamento de Física da UFPR – Materiais ferroelétricos;
- A K. Cheetham do Mat.Res. Laboratory, University Califórnia at Santa Bárbara – Zeólitas;
- E. Falabella do CENPES, Petrobrás – Zeólitas.

Recursos Humanos

Docentes

1. **Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano**, Professor Titular, University of Oxford, Inglaterra 1969 a 1970.
2. **Prof. Dr. Glaucius Oliva**, Professor Titular e Chefe do Departamento de Física e Informática.
3. **Prof. Dr. Igor Polikarpov**, Professor Associado, Edinburgh University, EU, Grã-Bretanha 1993 a 1995. Max Planck Gesellschaft, MPG, Alemanha, 1991 a 1993. Academia de Ciências da Letônia, LAN, Letônia. 1989 a 1991
4. **Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann**, Professor Doutor, Instituto de Física de São Carlos, IFSC/USP, 01/08/1999 a 05/07/2001.
5. **Prof. Dr. Richard Charles Garratt**, Professor Associado, Instituto de Química e Física de São Carlos, IFQSC/USP - 1989 a 1992.
6. **Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas**, Professora Titular, Coordenadora do Grupo de Cristalografia, Harvard University, USA - 1972 a 1973. Aposentada em 22/07/2001.
7. **Prof. Dr. Javier Alcides Ellena**, Professor Doutor, contratado em 08/2002, Instituto de Física de São Carlos, IFSC/USP, 1998-2002.

Técnicos

1. José Augusto Lopes da Rocha, Técnico em Laboratório de Nível Médio
2. José Geraldo Catarino, Técnico Especializado de Nível Superior.
3. Norma Bianca Saes, Técnico Especializado de Nível Superior.
4. Susana Andrea Sculaccio, Técnica de Laboratório de Nível Médio.
5. Dulce Helena Ferreira de Sousa, Técnico Especializado de Nível Superior
6. Elisabeth de Mello Siqueira, Técnico em Laboratório – FAFQ.
7. Gustavo Luiz Barion, Técnico em Informática de Nível Médio – FAFQ.

Estagiários

1. Matheus Pereira Postigo – Informática, FAFQ, 01/05/01 a 31/01/02, supervisionado por Prof. Dr. Glaucius Oliva.
2. Alécio A. Pimenta Jr. – Aluno do Curso de Engenharia Física da UFSCar, estágio não remunerado, desenvolvendo projeto de pesquisa "Expressão e Caracterização Molecular da Rho1 de Trypanosoma cruzi (TcRho1)", 07/2001 a junho/2002, supervisionado pelo Prof. Dr. Prof. Otavio Henrique Thiemann.

Administração

1. Maria Helena Braga de Carvalho - Secretária
2. Francisco Fernando Falvo – Técnico Financeiro e Contábil
3. Jaciara Eliana Bianco - Secretária FAFQ
4. Maria Cláudia Amato – Secretária FAFQ (contratada em 01/04/2002)

Colaboradores Externos

- A K. Cheetham – Mat.Res.Lab., University of Califórnia, USA
- Alexander Golubev, INPI, Rússia
- Alzir Batista – UFSCar
- Angela K. Cruz - Departamento de Bioquímica, FMRP, USP.
- Andrew Simpson - Instituto Ludwig, SP
- Arlene G. Correa – DQ/UFSCar
- Carlos Fernando Aguilar, Universidade Nacional de San Luis, Argentina.
- Carlos Menck – ICB – USP
- Charlotte Ownby, Universidade de Oklahoma, USA
- Claudio Sampaio - Departamento de Bioquímica da Escola Paulista de Medicina
- Daniel Rigda, CENARGEN, Brasília-DF
- E. Falabella, CENPES, Petrobrás
- Elliot W. Kitajima - Departamento de Fitopatologia, ESALQ, USP.
- Flavio Henrique-Silva – UFSCar
- Faouzi Lakhdar-Ghazal, Laboratoire de Synthèse et Physicochimie de Molécules d'Intérêt Biologique, Groupe de Chimie Organique Biologique, Toulouse, França, 20 a 30/11/01.
- G. F. de Souza, Instituto de Química, UnB.
- Gilberto Domont – UFRJ
- Glória Regina Franco, UFMG
- Gracia D.F. Silva, Departamento de Química, UFMG.
- Heloisa S.S. de Araújo, UFSCar
- J. C. Fernandes, Instituto de Física, UFF.
- Jacques Perié, Groupe de Chimie Organique Biologique, Université Paul Sabatier.
- John Baxter, Universidade de Califórnia em San Francisco, USA.
- Jonas Perales, FIOCRUZ.
- Jorge Iulek - Universidade Estadual de Ponta Grossa, PR
- José Antonio Eiras, UFSCar, São Carlos, SP
- José Casas, Universidad Nacional de Santiago de Compostela-Espanha
- José Sordo, Universidad Nacional de Santiago de Compostela-Espanha

- ♦ Juan de Dios Alfonso - University of California Los Angeles, Los Angeles, USA
- ♦ Luana C. C. Coelho – UFPE
- ♦ Luiz Juliano Neto - Escola Paulista de Medicina, SP
- ♦ Miguel Abate, Departamento de Física, UFRJ
- ♦ Miriam Tendler – FIOCRUZ
- ♦ Olivia Arantes - Universidade Estadual de Londrina, PR
- ♦ Oscar Piro, Universidade Nacional de La Plata, Argentina
- ♦ Pascal Hoffmann, Groupe de Chimie Organique Biologique, Universite Paul Sebatier
- ♦ Paul Michels, Bruchelas, Bélgica
- ♦ Paul Web - Universidade de California em San Francisco, USA.
- ♦ Paulo Cesar Vieira – UFSCar
- ♦ Peter Seidl – UFRJ, Rio de Janeiro, RJ
- ♦ Renato A. Moreira - Universidade Federal do Ceará, CE
- ♦ Richard Ward – USP, Ribeirão Preto
- ♦ Robert Evans – Universidade de Londres, Inglaterra
- ♦ Roberto G. S. Berlinck - IQSC, USP.
- ♦ Rogério Meneghini, LNILS
- ♦ Rosa A. M. Medina - Instituto de Ciências Biológicas, USP.
- ♦ Sérgio Albuquerque - Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto.
- ♦ Sérgio Schenkman – UNIFESP
- ♦ Silvia Cuffini – Universidade Nacional de Córdoba, Argentina
- ♦ Victor Pereira, UFRGS
- ♦ Ulisses Gazos Lopes – IBCCF/CCS/UFRJ

Pesquisadores Visitantes

- ♦ Oscar Enrique Piro, Universidad Nacional de la Plata, La Plata, Argentina, de 31/12/01 a 31/01/02, e, de 13 a 23/09/02.
- ♦ John D. Baxter, Universidade de California em San Francisco, Presidente da Sociedade de Endocrinologistas Estados Unidos, de 25 a 26/03/02, e de 18 a 19/09/02 **Palestra:** 26/03/02, Tema: Receptores Nucleares. Importância Biológica e Potencial Farmacêutico,
- ♦ Paul Web - Universidade de California em San Francisco, USA, 25-26/03/02
- ♦ Carlos Fernando Aguilar, Universidade Nacional de San Luis, Argentina, 31/06 a 14/07/02
- ♦ Erica Gonçalves Gravina, Universidade de Brasília (UNB), 13-17/05/02
- ♦ Lawrence Shapiro, New York University, Mount Sinai Scholl of Medicine, Department of Physiology and Biophysics, New York, NY, USA, 17-19/05/02
- ♦ Astria Dias F. Gonzales, Departamento de Bioquímica Médica da Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ, colaboração científica, 13/07 a 12/08/02 e de 18/11 a 15/12/02
- ♦ Vitor Hugo Moreau da Cunha, Departamento de Bioquímica Médica da Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ, colaboração científica, 13/07 a 13/09/02, 18/11 a 15/12/02
- ♦ Prof. Dr. Alfredo Fusco – Departamento Biol. & Patol. Cellulare & Mol. , Facultad Medicina & Cirurgia Napoli, Naples, Italy, 09-10/08/02. **Ministrar** seminário, "Molecular Genetics of human thyroid carcinomas", Università di Naples "Federico II"
- ♦ Prof. Dr. Lakhdar-Ghazal Faouzi, Université Paul Sabatier, France, 19/08 a 02/09/2002 e de 30/11 a 11/12/02
- ♦ Prof. Dr. Lakhdar-Ghazal Faouzi, Université Paul Sabatier, France, dia 11/12/02 **seminário** sobre o trabalho que vem realizando com enzimas da família das Caspases, proteases envolvidas na via apoptótica, 30/11 a 10/12/02
- ♦ Prof. Sandro José de Souza, Instituto Ludwig, São Paulo, SP, 06/09/02. **Seminário:** Explorando o transcriptoma humano através da bioinformática",
- ♦ Dr. Alexandre Goloubev, Trabalhos de pesquisa junto ao Laboratório de Cristalografia IFSC, Russian Academy of Sciences, Neutron Research Department, St.Petersburg, Rússia, 08/11/02-27/02/03
- ♦ Dr. Yancho Devedjiev, Department of Molecular Physiology & Biological Physics, University of Virginia, 05-18/09/2002
- ♦ Prof. Dr. Goeran, X-ray Research GmbH, Germany, 10-17/09/02.
- ♦ Prof. Dr. Saul Jacchieri, Instituto Ludwig, Hospital do Câncer, São Paulo – SP, 14 a 17/09/02 e de 09 a 14/10/02.
- ♦ Prof. Pablo Fernandez, Universidad Nacional de San Luis, Argentina, 25/09 a 11/10/02
- ♦ Juan de D. Alfonso, Ohio State University, Protozoologia, Caxambú, MG, 03-09/11/02
- ♦ Esteban Roden, Universidad Nacional de San Luis, Argentina, 25/09 a 11/10/02
- ♦ Luiz Simeoni, Universidade de Brasília - UnB – Brasília, DF, de 26 e 27/11/02
- ♦ Francisco Neves, Universidade de Brasília - UnB – Brasília, DF, de 26 e 27/11/02
- ♦ Profa. Débora Foguel, Universidade Federal do Rio de Janeiro, UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, de 05-06/12/02. **ministrar** palestra "O lado sombrio do envelhecimento proteico".
- ♦ Dra. Maria Auxiliadora Morim Santos, "Estudos estruturais de Receptores nucleares", 01/2002 a 11/2003.

Linhas de Pesquisa

Título 1: "Determinação de estrutura cristalina de policristais por difração de raios X e difração de neutrons"

Pessoal Envolvido:

- ♦ Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas – Docente
- ♦ Ademir Geraldo Cavalari Costalonga – Pós-Doc
- ♦ Antonio Carlos Doriguetto – Pós-Doc
- ♦ Mirta Mir Caraballo – Pós-doc
- ♦ Walcinyr Bragatto Neto – IC
- ♦ Luiz Paulo Lopes - IC
- ♦ José Geraldo Catarino - Técnico
- ♦ José Augusto Lopes da Rocha - Técnico

Agência Financiadora:

- ♦ FAPESP
- ♦ CNPq/ PADCT

Objetivos: Determinação da estrutura cristalina de compostos de interesse tecnológico relacionando-as com propriedades físicas, catalíticas, etc.

Resultados: Trabalhos publicados na área de difração de pó (20 trabalhos publicados em 2002); vários serviços prestados a comunidade.

Título 2: "Determinação de estrutura molecular de monocristais por difração de raios X."

Pessoal envolvido

- ♦ Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano - Docente
- ♦ Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas - Docente
- ♦ Prof. Dr. Glaucius Oliva – Docente
- ♦ Dr. Javier Alcides Ellena – Pós-doc / Docente
- ♦ José Ricardo Sabino – Doutorando
- ♦ Sauli dos Santos Junior – Doutorando
- ♦ Alexandre Suman de Araujo – Mestrando / Doutorando
- ♦ Márcio Boer Ribeiro – Mestrando
- ♦ José Geraldo Catarino - Técnico
- ♦ José Augusto Lopes da Rocha - Técnico
- ♦ Norma Bianca Saes – Técnica

Agência Financiadora:

- ♦ FAPESP (projeto Temático)
- ♦ CNPq.

Objetivos: Determinação de estrutura cristalina e molecular de complexos organo-metálicos e produtos orgânicos naturais ou sintéticos.

Resultados: Foram resolvidas estruturas de complexos de rutênio com ligantes orgânicos de aplicações biológicas e catalíticas; estruturas de calixarenos; complexos de ligantes orgânicos

com metais de transição de interesse biológico e farmacológico; compostos modelos para o núcleo bimetálico Fe-Zn das metaloenzimas Fosfatases Ácidas Púrpuras e estruturas de compostos naturais de interesse biológico e farmacológico.

Foram coletados dados de difração de raios x até alta resolução para estudo de densidade de carga de complexos metais de transição e ligantes orgânicos. Duas (2) dissertações de mestrado defendidas. 37 trabalhos publicados em 2002.

Título 3: "Espalhamento de raios X a baixo ângulo"

Pessoal envolvido:

- ♦ Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas – Docente
- ♦ Prof. Dr. Igor Polikarpov
- ♦ Dr. Javier Alcides Ellena – Pós-doc/docente
- ♦ Antonio Carlos Doriguetto – Pós-doc
- ♦ Hannes Fischer – doutorando
- ♦ Ricardo Aparício – doutorando
- ♦ José Ricardo Sabino – doutorando
- ♦ Sauli dos Santos Junior – doutorando
- ♦ Alexandre de Araujo – Mestrando / Doutorando
- ♦ Márcio Boer Ribeiro – Mestrando
- ♦ José Geraldo Catarino - Técnico
- ♦ José Augusto Lopes da Rocha - Técnico
- ♦ Norma Bianca Saes - técnica

Agência Financiadora:

- ♦ CNPq/FAPESP

Objetivos: Análise de estado de agregação, de oligomerização ou de variação conformacional de proteínas em solução.

Resultados: Medidas realizadas no LNLS resultaram em excelente publicação no Journal of Molecular Biology e outro aceito no Journal Biological Chemistry e várias publicações em andamento.

Título 4: "Biologia molecular "

Pessoal envolvido

- ♦ Prof. Dr. Glaucius Oliva - Docente
- ♦ Prof. Dr. Richard Charles Garratt - Docente
- ♦ Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann – Docente
- ♦ Prof. Dr. Igor Polikarpov - Docente
- ♦ Edson Roberto da Silva – Pós-Doc
- ♦ Fernando Pavão – Pós-Doc
- ♦ Stefano Trapani – Pós-Doc
- ♦ Maria Teresa da Silva – Pós-Doc
- ♦ Maria Auxiliadora Morin Santos – Pós-Doc
- ♦ Raquel kely Bortoleto Bugs - Pós-Doc
- ♦ Cláudia E. Munte – Pós-Doc
- ♦ Cláudia Aparecida Alves – Doutorando
- ♦ Frederico Moraes Ferreira – Doutorando
- ♦ Hamilton Barbosa Napolitano – Doutorando
- ♦ Hannes Fischer – Doutorando
- ♦ Marcelo Santos Castilho – Doutorando
- ♦ Márcio Silva – Doutorando
- ♦ Paulo Henrique Conaggin Godoi – Doutorando
- ♦ Paulo Sérgio Monzani – Doutorando
- ♦ Rodrigo Portugal – Doutorando
- ♦ Adriana Lucely Roja – Doutorando
- ♦ Fábio Macedo Nunes – Doutorando
- ♦ Mário Sanches Matilde Junior – Doutorando
- ♦ Ricardo Aparício – Doutorando
- ♦ Sandra Krauchenco – Doutorando
- ♦ Sandra Martha Gomes Dias – Doutorando
- ♦ Artur Torres Cordeiro – Doutorando
- ♦ Luiz Marcelo Eugênio – Doutorando
- ♦ Monique Mantovani – Doutorando
- ♦ Humberto d'Muniz Pereira – Doutorando
- ♦ Marcos Roberto Bonfadini – Doutorando
- ♦ Marcos Vicente de Albuquerque S. Navarro – IC/Doutorando
- ♦ Rosa Maria Fernandes Cardoso – Doutorando
- ♦ Wanius J. Garcia Silva – Doutorando
- ♦ Celina de Pieri – Mestrando / Doutorando
- ♦ João Renato Carvalho Muniz – Mestrando/Doutorando
- ♦ André Luis Bertelli Ambrósio – Mestrando
- ♦ Antonio Joaquim da Silva Neto – Mestrando
- ♦ Ivan Silvestre Paganini Marin - IC
- ♦ Juliana Ribeiro Gabriel – IC
- ♦ Luana de Freitas Nascimento – IC
- ♦ Alécio Antonio Pimenta Junior – IC
- ♦ Ana Carolina Sousa da Silva – IC
- ♦ Carlos Eduardo Desuo – IC
- ♦ Dulce Helena Ferreira de Souza - Técnica
- ♦ José Geraldo Catarino - Técnico
- ♦ José Augusto Lopes da Rocha - Técnico
- ♦ Norma Bianca Saes - Técnica
- ♦ Susana Andrea Sculaccio – Técnica

Agência Financiadora:

- ♦ Fapesp, World Health Organization – UNDP/TDR/World Bank, CNPq, Howard Hughes Medical Institute - HHMI

Objetivos: Clonagem e expressão recombinante de proteínas de interesse.

Subclonagem em vetores adequados à superexpressão e purificação facilitada.

Estudos de cinética enzimática e funcionais das enzimas recombinantes.

Subclonagem em vetores adequados à expressão aumentada e purificada facilitada.

Preparação de Mutantes Sítio-Dirigidos.

Resultados: Várias proteínas foram clonadas, inseridas em vetores de expressão adequados, expressas de forma recombinante, purificadas e estudadas estruturalmente (ver lista de projetos acima).

04 trabalhos publicados. 03 dissertações de Mestrado defendidas.

Título 5: "Cristalografia de Proteínas"

Pessoal envolvido:

- Prof. Dr. Glaucius Oliva - Docente
- Prof. Dr. Richard Charles Garratt - Docente
- Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas - Docente
- Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano – Docente
- Prof. Dr. Otávio Henrique Thiemann – Docente
- Prof. Dr. Igor Polikarpov – Docente
- Edson Roberto da Silva – Pós-Doc
- Fernando Pavão – Pós-Doc
- Stefano Trapani – Pós-Doc
- Maria Teresa da Silva – Pós-Doc
- Cláudia Aparecida Alves – Doutorando
- Frederico Moraes Ferreira – Doutorando
- Hamilton Barbosa Napolitano – Doutorando
- Marcelo Santos Castilho – Doutorando
- Márcio Silva – Doutorando
- Paulo Henrique Conaggin Godoi – Doutorando
- Paulo Sérgio Monzani – Doutorando
- Rodrigo Portugal – Doutorando
- Adriana Lucely Roja – Doutorando
- Fábio Macedo Nunes – Doutorando
- Mário Sanches Matilde Junior – Doutorando
- Ricardo Aparício – Doutorando
- Sandra Krauchenco – Doutorando
- Sandra Martha Gomes Dias – Doutorando
- Artur Torres Cordeiro – Doutorando
- Luiz Marcelo Eugênio – Doutorando
- Monique Mantovani – Doutorando
- Humberto d'Muniz Pereira – Doutorando
- Marcos Roberto Bonfadini – Doutorando
- Marcos Vicente de Albuquerque S. Navarro – IC/ Doutorando
- Rosa Maria Fernandes Cardoso – Doutorando
- Wanius J. Garcia Silva – Doutorando
- Celina de Pieri – Mestrando / Doutorando
- André Luis Bertelli Ambrósio – Mestrando
- Antonio Joaquim da Silva Neto - Mestrado
- Juliana Ribeiro Gabriel – IC
- Luana de Freitas Nascimento – IC
- Ana Carolina Sousa da Silva – IC
- Dulce Helena Ferreira de Souza - Técnica

Agências Financiadoras:

- Fapesp
- World Health Organization – UNDP/TDR/WORLD BANK
- Cnpq/Pronex
- Howard Hughes Medical Institute – HHMI
- Centro de Biotecnologia Argentino-Brasileiro - CBAB

Objetivos: Identificação e purificação de proteínas e ácidos nucleicos;

Cristalização de macromoléculas biológicas;

Determinação da estrutura molecular tridimensional de proteínas, com detalhe atômico, por técnicas cristalográficas de difração de raios X por monocristais.

Estudos da correlação entre estrutura-função.

Resultados: Inúmeras estruturas resolvidas, incluindo:

- Superóxido dismutase de *Plasmodium falciparum*, a primeira estrutura do parasita responsável pela Malária a ser resolvida no Brasil;
- Superóxido dismutase de *T. cruzi* (Doença de Chagas);
- Enolase de *T. brucei* alvo para planejamento de drogas contra a doença do sono;
- Primeira estrutura de um receptor nuclear a ser resolvida no Brasil. São proteínas com inúmeras aplicações industriais no tratamento de uma série de doenças incluindo diabetes, obesidade, câncer, etc.;
- Estrutura de Thi1, proteína de planta associada ao reparo de DNA;
- Resultados obtidos com a proteína APRT de *H. sapiens* (h-APRT): A h-APRT foi cristalizada e a estrutura tridimensional foi determinada por substituição molecular.
- 02 teses de doutorado defendidas
- 07 trabalhos publicados.

Título 6: "Modelagem molecular."**Pessoal envolvido**

- Prof. Dr. Glaucius Oliva - Docente
- Prof. Dr. Richard Charles Garratt - Docente
- Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano – Docente
- Prof. Dr. Otávio Henrique Thiemann – Docente
- Prof. Dr. Igor Polikarpov – Docente
- Fernando Pavão – Pós-Doc
- Stefano Trapani – Pós-Doc
- Carlos Henrique Tomich de Paula da Silva – Pós-Doc
- Marcelo Santos Castilho – Doutorando
- Márcio Silva – Doutorando
- Artur Torres Cordeiro – Doutorando
- Luiz Marcelo Eugênio – Doutorando
- Humberto d'Muniz Pereira – Doutorando
- Rosa Maria Fernandes Cardoso – Doutorando
- Celina de Pieri – Mestrando / Doutorando
- João Renato Carvalho Muniz – Mestrando/Doutorando
- Antonio Joaquim da Silva Neto – Mestrando
- Ivan Silvestre Paganini Marin - IC
- Lucas Larcher Caliri – IC
- Juliana Ribeiro Gabriel – IC
- Luana de Freitas Nascimento – IC
- Alécio Antonio Pimenta Junior – IC
- Ana Carolina Sousa da Silva – IC
- Carlos Eduardo Desuo – IC
- Marcos Vicente de Albuquerque S. Navarro – IC / doutorando
- Dulce Helena Ferreira de Souza - Técnica

- Norma Bianca Saes - Técnico

Agência Financiadora:

- Fapesp
- World Health Organization – UNDP/TDR/World Bank
- CNPq – Pronex
- Howard Hughes Medical Institute - HHMI

Objetivos: Modelagem molecular de proteínas, peptídeos;

Técnicas computacionais de simulação: minimização de energia e dinâmica molecular;

Análise da qualidade de modelos estruturais de proteínas;

Análise de correlação estrutura-função das moléculas modeladas.

Resultados: Durante o ano de 2002, a base de dados NCBI-open3D (contendo cerca de 220.000 moléculas) do Instituto Nacional do Câncer dos Estados Unidos foi devidamente preparada para finalidades de docking com busca em base de dados para novos inibidores da APRT de *Leishmania tarentolae*. Simulações também foram realizadas com a LtAPRT e alguns inibidores já testados em laboratório contra a referida enzima, tais como o aurapteno e alguns derivados do ácido cinâmico., para fins de predição da orientação dos ligantes antes de se realizar a cristalografia dos complexos. Cálculos de potencial de interação molecular (MIP) também foram realizados e os resultados foram determinantes para a discussão do mecanismo catalítico das APRTases, o qual ainda não foi completamente elucidado. Após a resolução da estrutura da LtAPRT em nosso laboratório, uma extensa análise estrutural foi realizada com base nos cálculos de MIP e na superposição de todas as estruturas de PRTases até aquele momento resolvidas.

Publicado artigo NEVES-FERREIRA, A G C; PERALES, J; FOX, J W; SHANNON, J D; MAKINO, D L; GARRATT, R C; DOMONT, G B. Structural and Functional analyses of DM43, a snake venom metalloproteinase inhibitor from *Didelphis marsupialis* serum. J. Biol. Chem., Bethesda, vol. 277, n. 15, p. 13129-13137, Apr 2002. Fator de impacto: 07.368.

Resultados obtidos com a proteína APRT de *L. tarentolae* (l-APRT): A l-APRT pura foi utilizada na busca de inibidores a partir de extratos de plantas e poríferos marinhos. Nos últimos 12 meses, foram realizados 1.112 testes de inibição em essa enzima. A l-APRT também foi utilizada em estudos de "Docking" com o propósito de orientar inibidores, selecionados através dos testes de inibição, no sítio ativo da enzima em estudo.

Resultados obtidos com a proteína APRT de *H. sapiens* (h-APRT): O gene de h-APRT foi clonado, a proteína foi expressada e purificada.

Título 7: "Planejamento racional de drogas farmacêuticas."**Pessoal envolvido**

- Prof. Dr. Glaucius Oliva - Docente
- Prof. Dr. Richard Charles Garratt - Docente
- Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano – Docente
- Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann – Docente
- Prof. Dr. Igor Polikarpov – Docente
- Márcio Silva – Doutorando
- Humberto d'Muniz Pereira – Doutorando
- Marcelo Santos Castilho – Doutorando
- Stefano Trapani – Pós-Doc
- Fernando Pavão – Pós-Doc
- Carlos Henrique Tomich de Paula da Silva – Pós-Doc
- Dulce Helena Ferreira de Souza - Técnica
- José Geraldo Catarino - Técnico
- José Augusto Lopes da Rocha - Técnico
- Norma Bianca Saes - Técnica
- Susana Andrea Sculaccio – Técnica

Agência Financiadora:

- Fapesp
- World Health Organization – UNDP/TDR/World Bank
- CNPq – Pronex
- Howard Hughes Medical Institute-HHMI

Objetivos: Planejamento de inibidores e ligantes de proteínas alvo específicas associadas a doenças humanas e de animais, potenciais drogas terapêuticas, baseado na estrutura tridimensional dos alvos moleculares.

Busca de compostos de partida em bases de dados estruturais

Busca de compostos de partida em produtos naturais (extratos brutos e substâncias puras) otimização de compostos de partida com respeito à propriedades farmacológicas, por planejamento racional.

Resultados: Foram realizados centenas de testes de inibição enzimática da enzima gGAPDH de *T. cruzi* utilizando compostos de origem sintética e isolados de plantas da flora brasileira. Dentre os compostos sintéticos, os derivados de cumarinas e nucleosídeos apresentaram atividade inibitória melhor do que a chalepina. Dentre os compostos de origem natural foi identificada uma nova classe de inibidores, os ácidos anacárdicos, que se mostraram dez vezes mais ativos que a chalepina contra a gGAPDH. Além disso, a enzima gGAPDH foi co-cristalizada com um inibidor irreversível e com um inibidor reversível. O estudo desses complexos possibilitou um melhor entendimento do mecanismo catalítico da enzima e o planejamento de novos inibidores que serão sintetizados pelo prof. Jack Perle da Universidade Paul Sabatier (Toulouse, França). Estudos de modelagem molecular realizados com os derivados cumarínicos possibilitaram criar um modelo de interação segundo o qual novos compostos foram planejados e sintetizados pela prof. Mônica T. Pupo da Faculdade de Ciências Farmacêuticas da USP-RP; 19 trabalhos publicados.

Um aspecto importante no processo de descoberta de novos fármacos esta sendo agora implantado no grupo, a saber, os métodos de Química Medicinal e Computacional, particularmente QSAR. Fundamental para esta nova área foi a incorporação ao grupo do Jovem Pesquisador Dr. Adriano Andricopulo, com bolsa FAPESP.

Título 8: "Estudos Experimentais da Densidade de Carga de Compostos de Interesses Farmacológicos"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano - Docente
- Dr. Javier Alcides Ellena - Pós-Doc / Docente
- José Ricardo Sabino – Doutorando
- Sauli dos Santos Junior – Doutorando
- Alexandre Suman de Araujo – Mestrando / Doutorando
- Márcio Boer Ribeiro – Mestrando
- José Geraldo Catarino - Técnico
- José Augusto Lopes da Rocha - Técnico

Agência Financiadora:

- FAPESP

Objetivos: Estudos de propriedades eletrônicas.

Resultados: Novas estruturas foram determinadas e seus resultados estão sendo analisados quanto à sua atividade. O aluno José Ricardo Sabino desenvolveu estágio na State University of New York at Buffalo – Buffalo – NY-USA, no período de 15/10/01 a 15/04/02 para realizar medidas de difração de raios X de alta energia para o estudo de alta resolução da estrutura Cu(II)-L-alanyl-L-valine. Os dados estão em fase de análise.

Título 9: "Filogenia das enzimas envolvidas na cadeia de síntese de purinas - Estudos filogenéticos da via de salvamento e síntese de-novo de purino nucleotídeos"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann (Docente)

Agência Financiadora:

- FAPESP (Jovem Pesquisador)

Resultados: 1 resumo em congresso nacional.

Título 10: "Sugar Cane EST sequencing (SUCEST) project e Data-mining Sugar Cane EST sequencing (SUCEST) project. Participação, como coordenador do laboratório de seqüenciamento, no projeto SUCEST de seqüenciamento do genoma da Cana-de-açúcar e Estudo e identificação de genes seqüenciados no projeto genoma da cana-de-açúcar"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann (Docente)

- Susana Andréa Sculaccio (Ms & Técnica)

Agência Financiadora:

- FAPESP-ONSA

Resultados: Foram iniciados trabalhos de genômica funcional, resultando em uma apresentação em congresso (SBBq). 01 trabalho publicado.

Publicações

Artigo Publicado em Periódico – Internacional

1. ABBATE, M; GUEVARA, J A; CUFFINI, S L; MASCARENHAS, Y.P.; MORIKAWA, E. Electronic structure and metal-insulator transition in SrTi1-xRuO3. *European Physical Journal B*, Les Ulis, v. 25, n. 2, p. 203-208, 2002.
2. ALBORES, P; CHAIA, Z D; BARALDO, L; CASTELLANO, E E; PIRO, O E. A complex containing three different kinds of Ru-N bonds: ethoxydinitronitrosyl (N,N,N',N'-tetramethylethylene)diamine-k POT.2N,N')ruthenium(II). *Acta Crystallogr. C*, Copenhagen, vol. 58, n. 4, p. m235-m236, Mar. 2002. Fator de impacto: 00.543
3. APARICIO, R; FISHER, H; SCOTT, D J; VERSCHUEREN, K H G; KULMINSKAYA, A A; ENEISKAYA, E V; NEUSTROEV, K N; CRAIEVICH, A F; GOLUBEV, A M; POLIKARPOV, I. Structural insights into the 'beta'-mannosidase from T. reesei obtained by synchrotron small-angle X-ray solution scattering enhanced by X-ray crystallography. *Biochem.*, Washington, vol. 41, n. 30, p. 9370-9375, Jul. 2002. Fator de impacto: 04.221
4. Arand, M; Golubev, A.M; Neto, J.R.B; POLIKARPOV, Igor; Wattiez, R; Korneeva, O.S; Eneyskaya, E.V; Kulminskaya, A.A; Shabalin, K.A; Shishliannikov, S.M; Chepurnaya, O.V; Neustroev, K.N. Purification, characterization, gene cloning and preliminary X-ray data of the exo-inulinase from *Aspergillus awamori*. *Biochemical Journal*, London, v. 362, p. 131-135, 2002.
5. ARAUJO, M P; QUEIROZ, S L; BATISTA, A A; PANEPUCCHI, E H; OLIVA, G; CASTELLANO, E E. Trichloro-bridged diruthenium (III,III) complexes: X-ray isomorphous structures of 'Ph IND.3'X=O...H...O=X'Ph IND.3'] [Ru IND.2'Cl IND.7' (X'Ph IND.3') IND.2'] 0.5 (C'H IND.2'Cl IND.2') (H IND.2'O) (X=As or P). *Trans. Metal Chem.*, Dordrecht, vol. 27, n. 1, p. 110-114, Feb 2002. Fator de impacto: 00.561.
6. ARAUJO, M H; RAJAO, D A; DORIGUETTO, A C; ELLENA, J; CASTELLANO, E E; HITCHCOCK, P B; CALIMAN, V. Novel organophosphorus cage compound produced by an unexpected oxidative coupling of 1,2,4-triphosphole: crystal and molecular structures of two isomers of formula (P IND.6'C IND.4'B'U IND.4 POT. t'CHSiM'e IND.3'. *J. Braz. Chem. Soc.*, Sao Paulo, vol. 13, n. 5, p. 555-558, Sep-Oct 2002. Fator de impacto: 00.402
7. AYALA, A P; PASCHOAL, C W A; GESLAND, J Y; ELLENA, J; CASTELLANO, E E; MOREIRA, R L. Single -crystal structure determination and infrared reflectivity study of the 'Li IND.2'CaHfF IND.8' scheelite. *J. Phys.: Condens. Matter*, Bristol, vol. 14, n. 22, p. 5485-5495, 2002. Fator de impacto: 01.608.
8. Benelli, E.M; Buck, M; POLIKARPOV, Igor; E.M, de Souza; Cruz, L.M; Pedrosa, F.O. Herbaspirillum seropedicae signal transduction protein PII is structurally similar to the enteric GlnK. *European Journal Of Biochemistry*, Inglaterra, v. 269, p. 3296-3303, 2002.
9. BONALDO, M C; GARRATT, R C; CAUFOUR, P S; FREIRE, M S; RODRIGUES, M M; NUSSENZWEIG, R S; GALLER, R. Surface expression of an immunodominant malaria protein B cell epitope by yellow fever virus. *J. Mol. Biol.*, London, vol. 315, n. 4, p. 873-885, Jan. 2002. Fator de impacto: 05.388.
10. CABRAL, C B; IMASATO, H; ROSA, J C; LAURE, H J; SILVA C H T P; TABAK, M; GARRATT, R C; GREENE, L J. Fluorescence properties of tryptophan residues in the monomeric d-chain of *Glossoscolex paulistus* hemoglobin: an interpretation based on a comparative molecular model. *Biophys. Chem.*, Amsterdam, vol. 97, n. 2-3, p. 139-157, Jun. 2002. Fator de impacto: 01.578
11. CARRIO, J G; MASCARENHAS, Yvonne Primerano; YELON, W; SANTOS, I A; GARCIA, D; EIRAS, J A. Structure refinement of (sr,Ba)Nb IND.2'O IND.6'ceramic powder from neutron and x-rays diffraction data. *Materials Research*, São Carlos, v. 5, n. 1, p. 57-62, 2002.
12. CASAS, J S; CASTELLANO, E E; ELLENA, J; HAIDUC, I; SANCHEZ, A; SEMENIUC, R F; SORDO, J. Supramolecular self-assembly in the crystal structures of methylmercury xanthates, MeHgS(S)COR, R=Et, 'ANTPOT. t'Pr' and 'CH IND.2' Ph. *Inorg. Chim. Acta*, Lausanne, vol. 329, p. 71-78, Feb. 2002. Fator de impacto: 01.200.
13. CASAS, J S; CASTANO, M V; CASTELLANO, E E; ELLENA, J; GARCIA-TASENDE, M S; GATO, A; SANCHEZ, A; SANJUAN, L M; SORDO, J. Metal-induced cyclization of thiosemicarbazones derived from 'BETA'-keto amides and 'BETA'-keto esters: open-chain and cyclized ligands in zinc(II) complexes. *Inorg. Chem.*, Washington, vol. 41, n. 6, p. 1550-1557, Mar. 2002. Fator de impacto: 02.712.
14. CASTELLANO, E E; PIRO, O E; CARAM, J A; MIRIFICO, M V; AIMONE, S L; VASINI, E J; MARQUEZ LUCERO, A; GLOSMAN MITNIK, D. Crystallographic study and molecular orbital calculations of thiadiazole derivatives. 2. 3,4-diphenyl-1,2,5-thiadiazole 1-monoxide. *J. Mol. Struct.*, Amsterdam, vol. 604, n. 2-3, p. 195-203, Feb. 2002. Fator de impacto: 00.849.
15. CASTELLANO, E E; PIRO, O E; PARAJO-COSTA, B S; BARAN, E J. Crystal structure and vibrational behaviour of tetraaqua-di(nicotinamide)M(II)-saccharinates, with M(II)=Co,Ni,Zn. *Z. Naturforsch. B*, Tuebingen, vol. 57, n. 6, p. 657-660, Jun. 2002. Fator de impacto: 00.635.
16. CASTRO, M A; CHAIA, Z D; PIRO, O E; CUKIERNIK, F D; CASTELLANO, E E; RUSJAN, M. A pyrazine bis-adduct of a binuclear rhodium(II) carboxylate containing 3,4,5-triethoxybenzoate as the equatorial ligand. *Acta Crystallogr. C*, Copenhagen, vol. 58, n. 7, p. m393-m395, Jul. 2002. Fator de impacto: 00.543.
17. CHALACA, M Z; FIGUEROA-VILLAR, J D; ELLENA, J A; CASTELLANO, E E. Synthesis and structure of cadmium and zinc complexes of dehydroacetic acid. *Inorg. Chim. Acta*, Lausanne, vol. 328, p. 45-52, 2002. Fator de impacto: 01.200.
18. DEFLO, V M; OLIVEIRA, D M; SOUSA, G F; BATISTA, A A; DINELLI, L R; CASTELLANO, E E. Oxovanadium(IV, V) complexes with 2-acetylpyridine-2-furanoylhydrazone (Hapf) as ligand: X-ray crystal structures of [VO IND.2'(apf)] and [V IND.2' (mu'-O) IND.2' (apf) IND.2']. *Z. Anorg. Allg. Chem.*, Tübingen, vol. 628, n. 5, p. 1140-1144, May 2002. Fator de impacto: 01.123
19. DORIGUETTO, A C; VIEIRA, H S; ELLENA, J A; TAKAHASHI, J A; BOAVENTURA, M A D; MASCARENHAS, Y P. A novel diterpene lactone. *Acta Crystallogr. E*, Copenhagen, vol. 58, p. 1392-1394, 2002.
20. FACCHIN, G; TORRE, M H; KREMER, E; PIRO, O E; CASTELLANO, E E; BARAN, E J. Synthesis and characterization of three new Cu(II)-dipeptide complexes. *J. Inorg. Biochem.*, New York, vol. 89, n. 3-4, p. 174-180, Apr. 2002. Fator de impacto: 01.460
21. FERNÁNDEZ, D; VEGA, D.; ELLENA, Javier Alcides; ECHEVERRIA, G. Losartan Potassium, a non-peptide agent for the treatment of arterial hypertension. *Acta Crystallographica Section C-Crystal Structure Communications*, Copenhagen, v. 58, p. 418-420, 2002.
22. FERRER, E G; WILLIAMS, P A M; CASTELLANO, E E; PIRO, O E. On a novel synthesis of 2-sulfonatobenzoic acid by oxidation of thiosalicylic acid catalyzed by copper (II): a structural study. *Z. Anorg. Allg. Chem.*, Tübingen, vol. 628, n. 9-10, p. 1979-1984, Sep. 2002. Fator de impacto: 01.123.
23. LADHANI, S; CAMERON, J; CHAPPLE, D S; GARRATT, R C; JOANNOU, C L; EVANS, R W. A novel method for rapid production and purification of exfoliative toxin A of *Staphylococcus aureus*. *FEMS Microbiol. Lett.*, Elsevier Science, vol. 212, n. 1, p. 35-39, Jun. 2002. Fator de impacto: 01.615.
24. LEE, W H; PERLES, L A; NAGEM, R A P; SHRIVE, A K; HAWKINS, A; SAWYER, L; POLIKARPOV, I. Comparison of different crystal forms of 3-dehydroquinase from *Salmonella typhi* and its implication for the enzyme activity. *Acta Crystallogr. D*, Copenhagen, vol. 58, p. 798-804, 2002. Fator de impacto: 03.067.
25. LOPES, L G F; SOUSA, E H S; MIRANDA, J C V; OLIVEIRA, C P; CARVALHO, I M M; BATISTA, A A; ELLENA, J; CASTELLANO, E E; NASCIMENTO, O R; MOREIRA, I S. Crystal structure, electrochemical and spectroscopic properties of the trans-K{[FeCl(NO POT.0')(cyclam)]}. [FeCl(NO POT.+')(cyclam)] IND.2' (P'F IND.6') IND.6'. *J. Chem. Soc. Dalton Trans.*, London, n. 9, p. 1903-1906, 2002. Fator de impacto: 02.502.
26. MONZANI, P S; ALFONZO, J D; SIMPSON, L; OLIVA, G; THIEMANN, O H. Cloning, characterization and preliminary crystallographic analysis of *Leishmania hypoxanthine-guanine phosphoribosyltransferase*. *Biochim. Biophys. Acta*, Amsterdam, vol. 1598, n. 1-3, p. 3-9, Jul. 2002. Fator de impacto: 01.399.
27. NAGEM, R A P; LUCCHESI, K W; COLAU, D; DUMOUTIER, L; RENAULD, J C; POLIKARPOV, I. Crystallization and synchrotron X-ray diffraction studies of human interleukin-22. *Acta Crystallogr. D*, Copenhagen, vol. 58, n. Mar., p. 529-530, 2002. Fator de impacto: 03.067.
28. NAGEM, R A P; COLAU, D; DUMOUTIER, L; RENAULD, J C; OGATA, C; POLIKARPOV, I. Crystal structure of recombinant human interleukin-22. *Struct.*, Cambridge, vol. 10, n. 8, p. 1051-1062, Aug. 2002. Fator de impacto: 06.681.
29. NAMOR, A F D; AI RAWI, N; PIRO, O E; CASTELLANO, E E; GIL, E. New lower rim calix(4)arene derivatives with mixed pendent arms and their complexation properties for alkali-metal cations. Structural, electrochemical, and thermodynamic characterization. *J. Phys. Chem. B*, Washington, vol. 106, n. 4, p. 779-787, Jan. 2002. Fator de impacto: 03.386.
30. NAMOR, A F D; CHAHINE, S; KOWALSKA, D; CASTELLANO, E E; PIRO, O E. Selective interaction of lower rim calix[4]arene derivatives and bivalent cations on solution. Crystallographic evidence of the versatile behavior of the acetonitrile in lead(II) and cadmium(II) complexes. *J. Am. Chem. Soc.*, Washington, vol. 124, n. 43, p. 12824-12836, Oct. 2002. Fator de impacto: 06.025
31. NEVES-FERREIRA, A G C; PERALES, J; FOX, J W; SHANNON, J D; MAKINO, D L; GARRATT, R C; DOMONT, G B. Structural and Functional analyses of DM43, a snake venom metalloproteinase inhibitor from *Didelphis marsupialis* serum. *J. Biol. Chem.*, Bethesda, vol. 277, n. 15, p. 13129-13137, Apr. 2002. Fator de impacto: 07.368.
32. PARAJO-COSTA, B S; BARAN, E J; PIRO, O E; CASTELLANO, E E. Crystal structure and vibrational behaviour of aqua di(saccharinato)di(nicotinamide) copper(II). *Z. Naturforsch. B*,

Tuebingen, vol. 57, n. 1, p. 43-46, Jan. 2002. Fator de impacto: 00.635.

33. PAULA, Q A; BATISTA, A A; CASTELLANO, E E; ELLENA, J. On the lability of dimethylsulfoxide (DMSO) coordinated to the ('Ru POT.II'-N'O POT.+') species: X-ray structures of mer-[RuCl IND.3'(DMSO) IND.2'(NO)] and mer-[RuCl IND.3'(CD IND.3'CN)(DMSO)(NO)]. J. Inorg. Biochem., New York, vol. 90, n. 3-4, p. 144-148, Jun. 2002. Fator de impacto: 01.460..
34. PAVAO, F; CASTILHO, M S; PUPO, M T; DIAS, R L A; CORREA, A G; FERNANDES, J B; SILVA, M F G F; MAFEZOLLI, I; VIEIRA, P C; OLIVA, G. Structure of Trypanosoma cruzi glycosomal glyceraldehyde-3-phosphate dehydrogenase complexed with chalepin, a natural product inhibitor, at 1.95 'ANGSTRON' resolution. Febs Lett., Amsterdam, vol. 520, n. 1-3, p. 13-17, Jun. 2002. Fator de impacto: 03.440.
35. PIRO, O E; CASTELLANO, E E; BARAN, E J. Crystal chemistry of the saccharinato complexes of trivalent lanthanides and yttrium. Z. Anorg. Allg. Chem., Tübingen, vol. 628, n. 3, p. 612-619, Mar. 2002. Fator de impacto: 01.123.
36. PIRO, O E; CASTELLANO, E E; PIATTI, R C V; BOLZAN, A E; ARVIA, A J. Two thiourea-containing gold(I) complexes. Acta Crystallogr. C, Copenhagen, vol. 58, n. 4, p. m252-m255, Mar. 2002. Fator de impacto: 00.543.
37. PIRO, O E; CASTELLANO, E E; ZAPATA, G E T; TRUJILLO, S B; BARAN, E J. Low temperature crystal structure of natural diosgenone. Z. Naturforsch. C, Tübingen, vol. 57, n. 9-10, p. 947-950, Sep-Oct. 2002. Fator de impacto: 00.709.
38. POELHSITZ, G V; ARAUJO, M P; OLIVEIRA, L A A; QUEIROZ, S L; ELLENA, J; CASTELLANO, E E; FERREIRA, A G; BATISTA, A A. fac-[RuCl IND.3' (NO)(dppb)] (I) and mer-[RuCl IND.3'(NO)(diop)] (II) complexes: syntheses, characterization and X-ray structures. Polyhedron, Oxford, vol. 21, n. 22, p. 2221-2225, Oct 2002. Fator de impacto: 01.036.
39. ROZAS, M F; PIRO, O E; CASTELLANO, E E; MIRIFICIO, M V; VASINI, E J. Novel synthesis of 3,4,4-trisubstituted thiadiazolines from 3,4-diphenyl-1,2,5-thiadiazole 1,1-dioxide. Competition with the intra-molecular aryl-aryl cyclization of 3,4-diphenyl-1,2,5-thiadiazole 1,1-dioxide. Synthesis, Stuttgart, vol. 16, p. 2399-2403, Nov. 2002. Fator de impacto: 02.193.
40. SA, M M; SILVEIRA, G P; CASTILHO, M S; PAVAO, F; OLIVA, G. Synthesis of acylated nucleosides and ribonic-1,4-lactones as inhibitors of trypanosomal glyceraldehyde-3-phosphate dehydrogenase (gGAPDH). Arkivoc [Online]. Disponível em <http://www.arkat-usa.org/ark/journal/2002/Padwa/AP-507H/AP-507H.pdf> [15 Janeiro 2002], Zurich, vol. 2002, p. 112-124, 2002.
41. SCHVEIGKARDT, J M; RIZZI, A C; PIRO, O E; CASTELLANO, E E; SANTANA, R C; CALVO, R; BRONDINO, C D. Structural and single crystal EPR studies of the complex copper L-glutamine: a weakly exchange-coupled system with syn-anti carboxylate bridge. Eur. J. Inorg. Chem., Weinheim, vol. 11, p. 2913-2919, Nov. 2002. Fator de impacto: 02.222.
42. SILVA, G D F; DUARTE, L P; VIEIRA, S A; DORIGUETTO, Antonio Carlos; MASCARENHAS, Y P; ELLENA, J; CASTELLANO, E E; COTA, A B. Epikatonian acid from Austroplencia populnea: structure elucidation by 2D NMR spectroscopy and X-ray crystallography. Magn. Reson. Chem., Sussex, vol. 40, n. 5, p. 366-370, May 2002. Fator de impacto: 01.006.
43. SOARES-COSTA, A; BELTRAMINI, L M; THIEMANN, O H; HENRIQUE-SILVA, F. A sugarcane crystatin: recombinant expression, purification, and antifungal activity. Bioch. Biophys. Res. Commun., San Diego, vol. 296, n. 5, p. 1194-1199, 2002. Fator de impacto: 03.055.
44. SOUSA, G. F. de; FILGUEIRAS, C. A. I.; MASCARENHAS, Y. P.; AZEVEDO, W. F. Synthesis, spectroscopic characterization and X-ray crystallographic studies of trans-[PtCl₂(Pet₃)(PySOR)] complexes, where PySOR = (2-methylsulphonyl)-pyridine and (2-n-propylsulphonyl) pyridine - Fator de impacto: 00.561. Transition Metal Chemistry, Inglaterra, v. 27, n. 4, p. 433-436, 2002.
45. VEGA, D.; FERNANDEZ, D.; ELLENA, Javier Alcides. Disodium Pamidronate. Acta Crystallographica, Section C-Crystal Structure Communications, Copenhagen, v. 58, p. 77-80, 2002.
46. VILLALBA, M E C; GUIDA, J A; PIRO, O E; CASTELLANO, E E; AYMUNINO, P J. Crystal structure of tetrabutylammonium nitroprusside dihydrate, [(C₄H₉)₄N][2Fe(CN)₅NO]·2H₂O, and vibrational spectra of ground and metastable excited states of the dihydrate and the anhydrate. Journal of Chemical Crystallography, New York, v. 31, n. 3, p. 155-166, 2002.
47. WATANABE, L; NIRTHANAN, S; RAJASEGER, G; POLIKARPOV, Igor; KINI, R M; ARNI, R K. Crystallization and preliminary x-ray analysis of bucin, a novel toxin from the malayan krait Bungarus candidus. Acta Crystallographica Section D-Biological Crystallography, Copenhagen, v. 58, p. 1879-1881, 2002.
48. WILLIAMS, P A M; FERRER, E G; BARAN, E J; PIRO, O E; CASTELLANO, E E. Characterization of a novel Cu-11,4,4'-bipyridine coordination polymer containing square grids. Z. Anorg. Allg. Chem., Tübingen, vol. 628, n. 9-10, p. 2044-2048, Sep. 2002. Fator de impacto: 01.123.
49. WILLIAMS, P A M; FERRER, E G; BARAN, E J; PIRO, O E; ELLENA, J.; CASTELLANO, E E. Synthesis and characterisation of a new Iron(II)/4,4'-bipyridine complex. Argentine Chemical Society, Argentina, v. 90, p. 109-115, 2002.
50. ZAMPIERI, R C L; VON POELHSITZ, G; BATISTA, A A; NASCIMENTO, O R; ELLENA, J; CASTELLANO, E E. Syntheses, characterization and X-ray structures of the fac-[RuCl IND.3'(NO)(dppe)] and the trans-[RuCl(NO)(dppe) IND.2'] POT.2+' species. J. Inorg. Biochem., New York, vol. 92, n. 1, p. 82-88, Sep. 2002. Fator de impacto: 01.460.
51. ZELCER, A; CHAIA, Z D; CUKIERNIK, F D; CASTELLANO, E E; PIRO, O E. A liquid crystal derived from ruthenium(II,III) and a long-chain carboxylate. Acta Crystallogr. D, Copenhagen, vol. 58, n. 3, p. m144-m146, 2002. Fator de impacto: 03.067.

Artigo de Periodico-Carta/Editorial - Internacional

1. MASCARENHAS, Y P. Crystallography and crystallographers: personal reflections on the past, the present and the future of crystallography on the occasion of the 125-year anniversary of Zeitschrift für Kristallographie. Z. Kristallogr., Oldenburg Verlag, vol. 217, n. 7-8, p. 348-349, 2002. Fator de impacto: 01.522.

Parte de Monografia - Nacional

1. FISCHER, H; DIAS, S M G; ALVES, A; ZANCHIN, N; CRAIEVICH, A F; FLETTERICK, R J; APRILETTI, J W; BAXTER, J D; NEVES, F; RIBEIRO, R C J; POLIKARPOV, I. Low resolution structures of the retinoid acid X receptor dimer and tetramer as revealed by synchrotron X-ray solution scattering. In: Activity report 2001. Campinas, LNLS, 2002. p. 43-44.
2. FORATO, L A; DORIGUETTO, A C; FISCHER, H; MASCARENHAS, Y P; CRAIEVICH, A; GARRATT, R C; COLNAGO, L A. Conformations of Z19 and pennisetin proteins in solution. In: Activity report 2001. Campinas, LNLS, 2002. p. 41-42.
3. TRAPANI, S; FISCHER, H; CRAIEVICH, A F; LINSS, J; GOLDENBERG, S; OLIVA, G. Characterisation of the dimeric organisation of phosphoenolpyruvate carboxykinase (PEPCK) from Trypanosoma cruzi in solution. In: Activity report 2001. Campinas, LNLS, 2002. p. 47-48.

Trabalho de Evento-Resumo - Internacional

1. ARAUJO, A S; CASTELLANO, E E. A computational system for comparison of molecular fragments of similar configuration. In: Annual Meeting of the American Crystallographic Association, San Antonio, 2002. Abstracts. San Antonio, American Crystallographic Association, 2002. p. 137, res. PP161.
2. CABRERA, R M; FISCHER, H; TRAPANI, S; CRAIEVICH, A F; GUIXE, V; BABUL, J; GARRATT, R C. Changes in the state of aggregation of the Pfk-2 enzyme induced by MgATP. In: Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, 19, Geneva, 2002. Abstracts. Geneva, 2002. C320. Em CD-ROM.
3. CASTELLANO, E E; PIRO, O E; NAMOR, A F D. Calix[4]arene lower rim ionic interactions and the formation of intra-molecular complexes. In: Annual Meeting of the American Crystallographic Association, San Antonio, 2002. Abstracts. San Antonio, American Crystallographic Association, 2002. p. 141, res. P175.
4. CASTELLANO, E E; PIRO, O E; NAMOR, A F D. Pre-organization and allostereism in complexes of Cd(II) and Pb(II) with calix[4] arene derivatives. In: Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, 19, Geneva, 2002. Abstracts. Geneva, 2002. p. C313. Em Cd-Rom.
5. CASTELLANO, E E; PIRO, O E; CASAS, S; NAMOR, A F D. Supramolecular interactions: single crystal X-ray diffraction studies of selected ligands and their complexes. Possible therapeutical and environmental applications. In: International Conference on Supramolecular Science and Technology, 3, Buenos Aires, 2002. Abstracts. Buenos Aires, The Global Supramolecular Chemistry Network - GSCN, 2002. p. 15.
6. CASTILHO, M S; PAVAO, F; LADAME, S; PERIE, J; OLIVA, G. Crystallographic structure of Trypanosoma cruzi gGAPDH complexed with (2-(2-phosphono-ethyl)-acrylic acid 4-nitro-phenyl ester at 2.75 'Angstrom' and with (2-(2-phosphono-ethyl)-acrylic acid 4-nitro-phenyl ester at 2.5 'Angstrom'. In: Keystone Symposia: Malaria's Challenge/ Drugs Against Tropical Protozoan Parasites, Keystone, 2002. Abstracts. Colorado, EUA, 2002. p. 91, res-201.
7. DORIGUETTO, A C; MASCARENHAS, Y P; ELLENA, J A; PEREIRA, C L M; CASTELLANO, E E; FERNANDES, N G; STUMPF, H O; MEIRA-BELLO, L C; LEITAO, U A. Crystal structure of cobalt-based chain molecular magnet CoCu(opba)(DMSO) IND.3' at room temperature and 100 K. In: Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, 19, Geneva, 2002. Abstracts. Geneva, 2002. p. C318. Em CD-ROM.
8. DORIGUETTO, A C.; MASCARENHAS, Y. P.; ELLENA, Javier Alcides; BOSCHI, T. M.; PIZANI, P. S.; KHAIDUKOV, N. M. Phase transitions in elpasolites (substitutional series Cs₂NaGaxSc_{1-x}F₆). In: ANNUAL MEETING, AMERICAN CRYSTALLOGRAPHIC ASSOCIATION, INC., 2002, San Antonio. ACA. San Antonio: ACA, 2002. p. 135-135.
9. ELLENA, J; CASTELLANO, E E; LOPES, L G F; OLIVEIRA, C P; SOUSA, E H S; MIRANDA, J C V; BATISTA, A A; NASCIMENTO, O R; MOREIRA, I S. Nitric oxide iron complex with both N'O POT.+ and N'O POT.0' forms. In: Annual Meeting of the American Crystallographic Association, San Antonio, 2002. Abstracts. San Antonio, American Crystallographic Association, 2002. p. 53, res. 08.03.02.

10. ELLENA, J A; RIBEIRO, M B; BATISTA, A A; SOUSA, J R; WONHRATH, K; DINELLI, L R; CASTELLANO, E E. Supramolecular organization in ruthenium complexes. In: Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, 19, Geneva, 2002. Abstracts. Geneva, 2002. p. C211. Em CD-ROM.
11. FERNANDES, N G; DINIZ, R; ELLENA, J; GUSTAFSSON, T. Charge density study of hexaaziquin(II) dihydrogen -1,2,4,5-benzenetetracarboxylate. In: Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, 19, Geneva, 2002. Abstracts. Geneva, 2002. p. C164. Em CD-ROM.
12. FISCHER, H; NEVES FERREIRA, A G C; PERALES, J; MOURA DA SILVA, A M; DOMONT, G B; SOUZA, D H F; GARRATT, R C; CRAIEVICH, A F. Insights into structural mechanism behind complex formation between a snake venom metalloproteinase and its natural inhibitor by synchrotron small-angle x-ray solution scattering. In: Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, 19, Geneva, 2002. Abstracts. Geneva, 2002. p. C292. Em CD-ROM.
13. GARRATT, R C; BONALDO, M C; CAUFOUR, P S; FREIRE, M S; RODRIGUES, M M; GALLER, R. Use of flavivirus for the novel expression of epitopes for immunization against other infectious agents including malaria. In: Keystone Symposia: Malaria's Challenge/ Drugs Against Tropical Protozoan Parasites, Keystone, 2002. Abstracts. Colorado, EUA, 2002. p. 85, res-110.
14. GARRATT, R C. Use of flavivirus for the novel expression of epitopes for immunization against other infectious agents including malaria. In: SIMPÓSIO DRUGS AGAINST TROPICAL PROTOZOAN PARASITES: TARGET SELECTION, STRUCTURAL BIOLOGY AND RATIONAL MEDICINAL CHEMISTRY, 2002, Keystone. Simpósio Drugs Against Tropical Protozoan Parasites. Keystone: 2002.
15. MARIN, I S P; THIEMANN, O H; OLIVA, G. Clonagem e caracterizacao de XPRT de Leishmania major. In: Simposio Internacional de Iniciacao Cientifica da Universidade de Sao Paulo, 10, Sao Carlos, 2002. Resumos. Sao Carlos, Universidade de Sao Paulo, 2002. res. 336. Em CD-ROM.
16. MASCARENHAS, Yvonne Primerano; DORIGUETTO, A C; ELLENA, J A; BOSCH, T M; PIZANI, P S. Estudo estrutural da elpasolita 'Cs IND.2'NaGa IND.x'Sc IND.1-x'F IND.6'(X=0; 0,2; 0,5; 0,8 e 1). In: 25A. REUNIAO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE QUIMICA., 2002, Pocos de Caldas. Abstracts. São Paulo: SBQ, 2002.
17. NASCIMENTO, L F; POLIKARPOV, I. Refinamento e análise estrutural do domínio C-terminal da proteína E2 do Papillomavirus bovino. In: Simposio Internacional de Iniciacao Cientifica da Universidade de Sao Paulo, 10, Sao Carlos, 2002. Resumos. Sao Carlos, Universidade de Sao Paulo, 2002. res. 333. Em CD-ROM.
18. OLIVA, G; PAVAO, F; CASTILHO M; GARRATT, R C; SILVA, G H T P; THIEMANN, O H; TRAPANI, S; VIEIRA, P C; MAFEZOLI, J; FERNANDES, J B; SILVA, M F G F; CORREA, A G; DIAS, R; LADAME, S; PERIE, J. Rational design and biodiversity in the search of new anti-chagasic drugs. In: Keystone Symposia: Malaria's Challenge/Drugs Against Tropical Protozoan Parasites, Keystone, 2002. Abstracts. Keystone-Colorado, 2002. p. 81, res-042.
19. OTERO, L.; NOBLIA, P.; GAMBINO, D.; CERECETTO, H.; MAIO, R. Di; GONZÁLEZ, M.; ELLENA, J A; PIRO, O E. Synthesis and characterization of new Ruthenium complexes with ACTIVE ligands against chagas disease. In: XXXV INTERNATIONAL CONFERENCE ON COORDINATION CHEMISTRY, 2002, Heidelberg. Abstracts, 2002.
20. PIRO, O E; CASTELLANO, E E; NAMOR, A F D. Calix[4]arene lower rim ionic interaction and the formation of intra-molecular complexes. In: Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, 19, Geneva, 2002. Abstracts. Geneva, 2002. p. C311. Em CD-ROM.
21. PIRO, O E; CASTELLANO, E E; VILLANUEVA SALAS, J; LARENA, A A; NAMOR, A F D. Calix[4]arene lower rim ionic interactions and the formation of intra-molecular complexes: crystallographic studies. In: International Conference on Supramolecular Science and Technology, 3, Buenos Aires, 2002. Abstracts. Buenos Aires, The Global Supramolecular Chemistry Network - GSCN, 2002. p. 23.
22. PUNTE, G.; ELLENA, Javier Alcides. Heavily Amino Substituted Dinitroanilines Molecular Structure and Supramolecular Architecture of Heavily Amino Substituted Dinitroanilines. In: CONGRESO DE SUPRAMOLECULAS EN BS AS., 2002, Abstracts. 2002.
23. SABINO, J R; CASTELLANO, E E. Experimental charge density study and topological analysis of Taurine at 100K. In: Annual Meeting of the American Crystallographic Association, San Antonio, 2002. Abstracts. San Antonio, American Crystallographic Association, 2002. p. 134, res. PPX148.
24. SANTOS JR, S; CASTELLANO, E E; QUEIROZ, S L; BATISTA, A A. The structure of the nitrosyl [RuCl IND.3'(NO)(P'Ph IND.3')(pyCN)] complex. In: Annual Meeting of the American Crystallographic Association, San Antonio, 2002. Call for papers. San Antonio, ACA, 2002. p. 144, res. PPX188.
25. SANTOS JR, S; CASTELLANO, E E; ELLENA, J A; TOMA, M; CASAS, J S; GARCIA-TASENDE, M S; SANCHES, A; SORDO, J. Supramolecular arrangement in dimethyl thallium complexes through Ti^{III}S. In: Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, 19, Geneva, 2002. Abstracts. Geneva, 2002. p. C314. Em CD-ROM.
26. SILVA, A C S; GARRATT, R C. Expressao, purificacao e cristizacao da fracao proteolitica da proteina NS3 do virus da febre amarela. In: Simposio Internacional de Iniciacao Cientifica da Universidade de Sao Paulo, 10, Sao Carlos, 2002. Resumos. Sao Carlos, Universidade de Sao Paulo, 2002. res. 1249. Em CD-ROM.
27. SILVA, M; OLIVA, G; ALMEIDA, A L C; VIEIRA, P C; THIEMANN, O H. Crystallization and inhibitor screenings of Leishmania adenine phosphosyltransferase. In: Keystone Symposia: Malaria's Challenge/ Drugs Against Tropical Protozoan Parasites, Keystone-Colorado, 2002. Abstracts. Colorado, 2002. p. 94, res-215.

Trabalho de Evento-Resumo - Nacional

1. ABEL, L.D.S.; CARVALHO, J.C.Q.; GARRATT, R. C.; BELTRAMINI, L.M. Desenvolvimento de modelos a serem aplicados no ensino de biologia molecular estrutural, no VIII Encontro perspectivas do ensino de biologia realizado na Faculdade de Educação da USP. In: VIII Encontro Perspectivas do Ensino de Biologia Realizado na Faculdade de Educação da USP 20-22 de Fevereiro de 2002, 2002, São Paulo. 2002.
2. ALMEIDA, A L C; VIEIRA, P C; SILVA, M F G F; FERNANDES, J B; SILVA, M; THIEMANN, O H; CASTILHO, M; OLIVA, G. Atividades Leishmanicida e tripanocida de alguns constituintes químicos de *Esenbeckia febrifuga* (rutaceae). In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. Sao Paulo, SBQ, 2002. res. PN-124.
3. ALVES, C A; OLIVA, G; SOUZA, D H. Estudos estruturais de duas enzimas envolvidas na biossíntese da goma fastidiana produzida pela bactéria *Xylella fastidiosa*. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p..
4. ALVIM, JR, J; CORREA, A G; DIAS, R L A; OLIVA, G; CASTILHO, M S; SILVA, C H T P. Síntese de cumarinas com potencial atividade inibitória da enzima gGAPDH de *T. cruzi*. In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. Sao Paulo, SBQ, 2002. res. QO-156.
5. AMBROSIO, A L B; GARRATT, R C. Crystallographic structures of three different forms of myotoxin ACL: a Lys49-PLA2 isolated from *Agkistrodon piscivorus piscivorus*. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. Sao Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p..
6. AMBROSIO, A.L.B.; SOUZA, D.H.F.; SELISTRE DE ARAÚJO, H.; Owby, C.; GARRATT, R.C. Studies of the interaction of fatty acids with LYS49-PLA2 by X-ray diffraction. In: XXXI REUNIÃO ANNUAL SBBQ, 2002, Caxambú. São Paulo: SBBQ, 2002.
7. AMBROSIO, A R P; VIEIRA, P C; FERNANDES, J B; SILVA, M F G F; THIEMANN, O H; OLIVA, G. Atividade inibitória de plantas da ordem rutales sobre a enzima APRT de *Leishmania tarentolae*. In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. Sao Paulo, SBQ, 2002. res. PN-135.
8. CALGARO, M R; POLIKARPOV, I. Clonagem e expressao do receptor X do pregnano (h-PXR). In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. Sao Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
9. CASTILHO, M S; OLIVA, G. Estudos de modelagem molecular de chalconas ferrocenicas e suas aplicacoes no planejamento racional de inibidores da enzima gGAPDH de *T. cruzi*. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. Sao Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
10. CORDEIRO, A T; THIEMANN, O H. Estudos estruturais comparativos das enzimas glicose 6-fosfato isomerase (PGI) de humano e de parasitos do genero leishmania. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. Sao Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p..
11. DIAS, S M G; POLIKARPOV, I. Expressao e purificacao do receptor nuclear humano para o hormonio tireoidiano objetivando estudos estruturais. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. Sao Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
12. DIAS, S M G; FISCHER, H; APRILLETI, J W; BAXTER, J D; NEVES, F A R; RIBEIRO, R C J; ZANCHIN, N I; POLIKARPOV, I. Low resolution synchrotron X-ray solution scattering structure of the human retinoid acid x receptor. In: XXXI REUNIÃO ANNUAL, SOCIEDADE BRASILEIRA DE BIOQUÍMICA E BIOLOGIA MOLECULAR/SBBQ, 2002, Caxambú. SBBQ. São Paulo: SBBQ, 2002. p. 172-172.
13. FERREIRA, F M; OLIVA, G. Estrutura cristalografica da N-acetilglicosamina 6-fosfato desacetilase de *Escherichia coli*. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. Sao Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
14. GALLO, M B C; VIEIRA, P C; SILVA, M F G F; FERNANDES, J B; RODRIGUES FILHO, E; CASTILHO, M S; OLIVA, G; ALBUQUERQUE, S; FERREIRA, C G. Atividade tripanocida de plantas de Pocos de Caldas. In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. Sao Paulo, SBQ, 2002. res. PN-126.
15. GARCIA, W.; ARAÚJO, APU; TANAKA, M.; GARRATT, R.G. Bradeion b: Heterologous Expression and Purification. In: XXXI REUNIÃO ANNUAL SBBQ, 2002, Caxambú. São Paulo: SBBQ, 2002.
16. GARCIA, W; GARRATT, R C. Estudos estruturais das proteínas bradeiona 'alfa' e 'beta': moléculas relacionadas com o desenvolvimento de cancer do colon, reto e melanoma maligno. In:

Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.

17. GARRATT, R C. The crystal structures of the enzyme purine nucleotide phosphorylase from *Schistosoma mansoni* refined at 2.75 and 1.75 Angstroms resolution. In: XXXI REUNIÃO ANUAL SBBQ, 2002, Caxambú. São Paulo: SBBQ, 2002.
18. GARRATT, R C. Crystallization and preliminary structural studies of the enzyme Fe-superoxide dismutase from *Trypanosoma cruzi*. In: XXXI REUNIÃO ANUAL SBBQ, 2002, Caxambú. São Paulo: SBBQ, 2002.
19. GARRATT, R C. Homology Modelling in Vaccine Design. In: PARTICIPAR DA XXXI REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE BIOQUÍMICA E BIOLOGIA MOLECULAR (SBBQ), 2002, Caxambú. SBBQ, São Paulo: SBBQ, 2002.
20. GARRATT, R C. Plastic models representative of nucleic acids and protein structures for the teaching of structural molecular biology. In: XXXI REUNIÃO ANUAL SBBQ, CAXAMBÚ, MG DE 18 A 21/05/2002, 2002, Caxambú: SBBQ, 2002.
21. MUNIZ, JRC; OLIVA, G; GARRATT, R. C.; SOUZA, DHF. Bioinformatic applied in studies of the enzymes involved in the biosynthesis of the exopolysaccharide, fastidian gum, produced by *Xylella fastidiosa*. In: XXXI REUNIÃO ANUAL SBBQ, 2002, Caxambú. São Paulo: SBBQ, 2002.
22. LEITE, N R; THIEMANN, O H. Estudos moleculares das triptofanil-tRNA-sintetases mitocondriais de humano e *Leishmania major*. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
23. LIMA, R J; TOLEDO JR, J C; SCARPELLINI, M; CASTELLANO, E E; FRANCO, D W. Síntese, caracterização e estrutura cristalina do novo nitrosilo complexo de rutênio(II), trans-[Ru(NH₃)₃IND.4P(O)(O⁻C IND.4H IND.9') IND.3'(NO)](CF IND.3'COO) IND.3'. In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. São Paulo, SBQ, 2002. res. QI-132.
24. LIRA, S P; BERLINCK, R G S; THIEMANN, O H; SILVA, M; ROCHA, R M. Isolamento e identificação de extrato ativo antileishmanioso da ascídia *Polysyncrator amethysteum*. In: Workshop de Pós-graduação, 8, São Carlos, 2002. Livro de Resumos. São Carlos, Instituto de Química de São Carlos - USP, 2002. p. 20.
25. LIRA, S P; BERLINK, R G S; THIEMANN, O H; SILVA, M; ROCHA, R M. Isolamento e Identificação de extrato ativo antileishmanioso da ascídia *Polysyncrator amethysteum*. In: XVII SIMPÓSIO DE BIOLOGIA MARINHA, 2002, São Sebastião. 2002.
26. MACHADO, S M F; MORAES, V R S; SILVA, M F G F; VIEIRA, P C; FERNANDES, J B; MARSAIOLO, A J; BITTRICH, V; OLIVA, G. Atividade inibitória das resinas florais de espécies de Clusia frente a enzima glicolítica GAPDH de *Trypanosoma cruzi*. In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. São Paulo, SBQ, 2002. res. QB-06.
27. MANTOVANI, M; THIEMANN, O H. Caracterização e cristalização da enzima adenilossuccinato liase (ADSL), envolvida na via de recuperação de purinas de *Leishmania major*. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
28. MARCHI, A A; ARCHANJO, F C; PUPO, M T; DEL PONTE, G; CASTILHO, M S; OLIVA, G. Síntese e atividade de cumarinas planejadas como inibidores da enzima gliceraldeído-3-fosfato desidrogenase (GGAPDH) de *Trypanosoma cruzi*. In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. São Paulo, SBQ, 2002. res. MD-023.
29. MARQUES, A S F; VIEIRA, P C; FERNANDES, J B; SILVA, M F G F; THIEMANN, O H; OLIVA, G; CASTILHO, M. Busca de inibidores de APRT e GAPDH em *Galipea carinata*. In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. São Paulo, SBQ, 2002. res. PN-119.
30. MENEZES, I R A; MONTANARI, C A; OLIVA, G; VIEIRA, P C; PAVAO, F; CASTILHO, M S. QSAR 3D cumarinas com afinidade pela GAPDH de *Trypanosoma cruzi*. In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. São Paulo, SBQ, 2002. res. MD-002.
31. MONZANI, P S; TRAPANI, S; OLIVA, G; THIEMANN, O H. Análise preliminar estrutural da hipoxantina-guanina fosforribosiltransferase (HGPRT) com GMP ligado de *Leishmania tarentolae*. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
32. MORAES, V R S; AMBROZIN, A R P; GARCIA, C F; PAULETTI, P M; RUIZ, A L T G; MAIA, B H L N S; FIRMINO, C A; NOGUEIRA, M A; SORIANO, M P C; SANNOMIYA, M; SILVA, M F G F; VIEIRA, P C; FERNANDES, J B; MAGALHAES, E G; MAGALHAES, A F; BOLZANI, V S; OLIVA, G. Atividade inibitória de flavonoides frente a enzima glicolítica GAPDH de *Trypanosoma cruzi*. In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de Resumos. São Paulo, SBQ, 2002. res. QB-045.
33. MUNIZ, J R C; OLIVA, G; GARRATT, R C; SOUZA, D H F. Modelagem molecular e estudos de "docking" de uma manossiltransferase (GumH) da *Xylella fastidiosa*. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
34. NAPOLITANO, H B; OLIVA, G. Estudos estruturais da fosforribosil pirofosfato sintetase (PRS) humana. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
35. NASCIMENTO, L F; PINHEIRO, C B; BARBOSA, J A R G; ALONSO, L G; PRATGRAY, G; POLIKARPOV, Igor. Refinement and structural analysis of C-terminal domain of the E2 protein from bovine papillomavirus. In: XXXI REUNIÃO ANUAL SOCIEDADE BRASILEIRA DE BIOQUÍMICA E BIOLOGIA MOLECULAR/SBBQ, 2002, Caxambú. SBBQ, São Paulo: SBBQ, 2002. p. 172-172.
36. NAVARRO, M; GARRATT, R C. Cristalização e estudos estruturais preliminares da enzima Fe-superoxido dismutase de *Trypanosoma cruzi*. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
37. NOGUEIRA, C M; CORREA, A G; PAVAO, F; OLIVA, G. Síntese do nucleosídeo carbocíclico derivado da adenina, possível inibidor da enzima gGAPDH de *T. cruzi*. In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. São Paulo, SBQ, 2002. res. QO-082.
38. NUNES, F M; POLIKARPOV, I. Expressão e purificação do receptor de hormônio tireoideano TRALFA IND.1'. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
39. OLIVEIRA, E A; AYALA, A P; GESLAND, J Y; ELLENA, J; CASTELLANO, E E; MOREIRA, R L. Estudo do pirocloro NaCaMgF IND.7' por meio das espectroscopias Raman e infravermelho. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 244.
40. PAULA, Q A; BATISTA, A A; ARAUJO, M P; CASTELLANO, E E; ELLENA, J; NASCIMENTO, O R. Aspectos estruturais em complexos de rutênio contendo o óxido nítrico e nitrilas como ligantes. In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. São Paulo, SBQ, 2002. res. QI-145.
41. PEREIRA, H M; CLEASBY, A; FRANCO, G R; GARRATT, R. The crystal structures of the enzyme purine nucleotide phosphorylase from *Schistosoma mansoni* refined at 2.75 and 1.75 angstroms resolution. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
42. PIERI, C; SOUZA, D H F; OLIVA, G. Expressão, purificação e caracterização das enzimas GumD e GumC envolvidas na biossíntese do exopolissacarídeo produzido pela *Xylella fastidiosa*. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
43. PLACERES NETO, A; SILVA, M F G F; VIEIRA, P C; FERNANDES, J B; RODRIGUES FILHO, E; THIEMANN, O H; OLIVA, G. O potencial do gênero *Rapanea* frente a enzima APRT de *Leishmania tarentolae*. In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. São Paulo, SBQ, 2002. res. PN-129.
44. POELHISITZ, G. Von; ZAMPIERI, R. C I.; SERRA, A C P.; BATISTA, A A.; CASTELLANO, E E.; ELLENA, J. Reação não usual entre RUCI3NO e a 2,9-dimetilfenatrolina (2,9-phen). Obtenção do complexo binuclear [NOCl2Ru-m-(oCH3)3-RuCl2NO](2,9-phenH). In: 25ª REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE QUÍMICA., 2002, Poços de Caldas. Abstracts. 2002.
45. PORTUGAL, R V; OLIVA, G. Estudos termodinâmicos e estruturais de heterodímeros dos receptores nucleares de ácido retinoico X (RXR) e de hormônio de tireoide (TR). In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
46. KRAUCHENCO, Sandra; SILVA, J A; MACEDO, R P; R, M L; MARANGONI, S; POLIKARPOV, Igor. The X-ray structure of a novel Kunitz-type trypsin inhibitor from seeds of *Copaifera langsdorffii*. In: XXXI REUNIÃO ANUAL SOCIEDADE BRASILEIRA DE BIOQUÍMICA E BIOLOGIA MOLECULAR/SBBQ, 2002, Caxambú. SBBQ, São Paulo: SBBQ, 2002. p. 172-172.
47. RODRIGUES, E; THIEMANN, O H. Expressão e purificação da enzima piruvato fosfato dikinase de *Trypanosoma cruzi*. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
48. ROJAS, A; NAGEM, R; POLIKARPOV, I. Refinement of 3-d structure of b-galactosidase from *penicillium* sp and its complex with galactose. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
49. ROJAS, Adriana L; NAGEM, R; POLIKARPOV, Igor. Refinement of 3-D structure of B-Galactosidase from *Penicillium* sp and its complex with galactose. In: XXXI REUNIÃO ANUAL SOCIEDADE BRASILEIRA DE BIOQUÍMICA E BIOLOGIA MOLECULAR/SBBQ, 2002, Caxambú. SBBQ, São Paulo: SBBQ, 2002. p. 171.
50. SABINO, J R; CASTELLANO, E E. Densidade de carga experimental e análise topológica de compostos de interesse farmacológico. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
51. SANTOS JUNIOR, C S; CASTELLANO, E E. Supramolecular arrangement in dimethyl-thallium complexes through TI...S. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
52. SANTOS, S L; JANUARIO, A H; PIETRO, R C L R; MARSIGLIA, D O M; GREGORINE, J P; PICCIRILO, M C C; SATO, D N; CASTELLANO, E E; FRANCA, S C. Constituintes químicos de

- Baccharis trimera e atividade antimicrobacteriana. In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Quimica, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. Sao Paulo, SBQ, 2002. res. PN-033.
53. SCARPELLINI, M; CASTELLANO, E E; NEVES, A; FRANCO, D W. Síntese e caracterização preliminar de um novo nitrato-complexo de cobre(II) modelo para a cobre nitrato redutase. In: Workshop de Pós-graduação, 8, São Carlos, 2002. Livro de Resumos. São Carlos, Instituto de Química de São Carlos - USP, 2002. p. 68.
 54. SCHEFER, R R; FERREIRA, M L; BROCKSOM, U; BROCKSOM, T J; OLIVA, G. Atividades tripanomicidas de quinonas e seus derivados. In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. São Paulo, SBQ, 2002. res. QO-157.
 55. SEVERINO, R P; FERNANDES, J B; VIEIRA, P C; SILVA, M F G F; OLIVA, G. Utilização de RLCCC no fracionamento do óleo de Anacardium occidentale e atividade inibitória de enzimas. In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. São Paulo, SBQ, 2002. res. PN-142.
 56. SILVA NETO, A J; GARRATT, R C. Expressão, caracterização e ensaios de cristalização da proteína SmRho em fusão com uma proteína ligadora de maltose - maltose binding protein. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p..
 57. SILVA, M; OLIVA, G. Estudos de biologia molecular e estrutural da enzima adenina fosforibosiltransferase de Leishmania tarentolae e de homo sapiens. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
 58. SILVA, M; THIEMANN, Otavio Henrique; OLIVA, G; IULEK, J. Crystallization and synchrotron X-ray data at 2.06 Å resolution of human adenine phosphoribosyltransferase (APRT). In: INTER-AMERICAN WORKSHOP ON THE USE OF SYNCHROTRON RADIATION: APPLICATIONS TO MACROMOLECULES AND BIOLOGICAL SYSTEMS, 2002, Campinas. LNLS - abstracts. Campinas:LNLS, 2002.
 59. SOUSA, J R; DINNELI, L R; MOREIRA, I S; ELLENA, J; CASTELLANO, E E; BATISTA, A A. Complexos de rutênio como espécies organizadoras de supramoleculares. In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. São Paulo, SBQ, 2002. res. QI-093.
 60. THIEMANN, O H; SILVA, M; OLIVA, G; ALMEIDA, A L C; VIEIRA, P C; IULEK, J. Co-crystallization and structure determination of adenine phosphoribosyltransferase (APRT) from Leishmania tarentolae with inhibitors. In: Reuniao Anual de Usuarios do LNLS, 12, Campinas, 2002. Resumos. Campinas, Laboratorio Nacional de Luz Sincrotron, 2002. p. 52.
 61. VON POELHSITZ, G; ZAMPIERI, R C L; BATISTA, A A; SERRA, A C P; CASTELLANO, E E; ELENA, J. Reação não usual entre "Ru/Cl IND.3'NO" e a 2,9-dimetilfenantrolina (2,9-phen). Obtenção do complexo binuclear [NO/Cl IND.2'Ru-'mu-'(OCH IND.3) IND.3'-Ru/Cl IND.2'NO](2,9-phenH). In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. São Paulo, SBQ, 2002. res. QI-140.
 62. ZAMPIERI, R C L; VON POELHSITZ, G; BATISTA, A A; CASTELLANO, E E; ELENA, J. [RuClNO(dppe)(C IND.2'O IND.4')] novo nitrosilo-complexo de rutênio(II). Síntese, caracterização e estrutura cristalográfica. In: Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. São Paulo, SBQ, 2002. res. QI-139.

Trabalho de Evento-Resumo Periodico - Internacional

1. RAJAO, D A; CALIMAN, V; ARAUJO, M H; DORIGUETTO, A C; ELLENA, J; CASTELLANO, E E; HITCHCOCK, P B. New cages derived from 1,2,4-triphosphol. Phosphorus Sulfur Silicon Relat.. Apresentado a(ao) International Conference on Phosphorus Chemistry, 15, Sendai, 2001.Elem., Amsterdam, vol. 177, n. 8-9, p. 2005-2006, 2002.
2. PAULA, Qa; BATISTA, Aa; NASCIMENTO, Or; THIEMANN, Otavio Henrique. Electron paramagnetic resonance study of the interaction of Ru(III)-sulfoxide with adenine. In: 10TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON BIOINORGANIC CHEMISTRY, 2002, Florence. Journal of Inorganic Biochemistry. Journal of Inorganic Biochemistry, 2002. v. 86.

Trabalho de Evento-Resumo Periodico - Nacional

1. BONALDO, M C; NUSSENZWEIG, R S; GARRATT, R C; RODRIGUES, M M. Development of 17D yellow fever virus as an expression vector for malaria antigens. Rev. Inst. Med. Trop. São Paulo, São Paulo, vol. 44, n. 12, p. p. 29 res. RT6d, 2002. /Apresentado a(ao) Annual Meeting on Basic Research in Chagas Disease, 29/Meeting of the Brazilian Society of Protozoology, 18, Caxambu, 2002./
2. MANTOVANI, M; PEDROSA, A L; CRUZ, A K; AGUILAR, C F; THIEMANN, O H. Molecular characterization and preliminary structural studies of leishmania major purine, salvage enzyme. Rev. Inst. Med. Trop. São Paulo, Supl., São Paulo, vol. 44, n. 12, p. p.78 res. BM 156, 2002. /Apresentado a(ao) Annual Meeting on Basic Research in Chagas Diseases, 29/Meeting of the Brazilian Society of Protozoology, 18, Caxambu, 2002./
3. NAVARRO, M; BORTOLETO, R; ARAUJO, A P; HOFFMANN, P; FOURNIER, D; GARRATT, R C. Crystallographic structure of the enzyme Fe-superoxide dismutase from Trypanosoma cruzi at 1.9 'angstrom' resolution:: a potential target for development of novel drugs against chagas disease. Rev. Inst. Med. Trop. São Paulo, São Paulo, vol. 44, n. 12, p. p. 36 res. OP4e, 2002. /Apresentado a(ao) Annual Meeting on Basic Research in Chagas Disease, 29/Meeting of the Brazilian Society of Protozoology, 18, Caxambu, 2002./
4. NAVARRO, M; BORTOLETO, R; DIVE, D; GARRATT, R C. Crystal structure of the iron superoxide dismutase from Plasmodium falciparum. Rev. Inst. Med. Trop. São Paulo, São Paulo, vol. 44, n. 12, p. p. 44 res. BM20, 2002. /Apresentado a(ao) Annual Meeting on Basic Research in Chagas Disease, 29/Meeting of the Brazilian Society of Protozoology, 18, Caxambu, 2002./
5. PEREIRA, H M; FRANCO, G R; CLEASBY, A; GARRATT, R C. High throughput x-ray crystallography for the discovery of new ligands of the enzyme purine nucleoside phosphorylase from Schistosoma mansoni. Rev. Inst. Med. Trop. de São Paulo, São Paulo, vol. 44, n. 12, p. p. 29 res. RT6d, 2002. /Apresentado a(ao) Annual Meeting on Basic Research in Chagas Disease, 29/Meeting of the Brazilian Society of Protozoology, 18, Caxambu, 2002./
6. PIMENTA JUNIOR, A A; NEPOMUCENO-SILVA, J L; MELO, L D B; LOPES, U G; BORTOLETO, R K; THIEMANN, O H. Expression and characterization of the recombinant Rho family homologue enzyme from Trypanosoma cruzi (TcRho1). Rev. Inst. Med. Trop. São Paulo, São Paulo, vol. 44, n. 12, p. p. 67 res. BM112, 2002. /Apresentado a(ao) Annual Meeting on Basic Research in Chagas Disease, 29/Meeting of the Brazilian Society of Protozoology, 18, Caxambu, 2002./
7. SILVA, M; OLIVA, G; THIEMANN, O H; SILVA, C H T P; GARRATT, R C; BATISTA, T; SELEGHIM, M H R; BERLINCK, R G S; IULEK, J. Adenine phosphoribosyltransferase from Leishmania tarentolae:: structure determination, catalytic mechanism proposal and new inhibitors screening. Rev. Inst. Med. Trop. São Paulo, São Paulo, vol. 44, n. 12, p. p. 44 res. BM19, 2002. /Apresentado a(ao) Annual Meeting on Basic Research in Chagas Disease, 29/Meeting of the Brazilian Society of Protozoology, 18, Caxambu, 2002.

Recursos Financeiros – Projetos de Pesquisa

1. Comunidade Econômica Européia/European Commission's Research Programmes - Auxílio Pesquisa - Cooperação Internacional Universidade de Gildford/Surrey, Processo ICA4-2001-10108, €126.000,00, "Mercury", vigência 01/08/2002 a 31/07/2005, Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano.
2. FAPESP - Auxílio Pesquisa - Temático, Processo 98/12151-1, R\$288.343,16 + US\$267.739,08, "Studies of The Molecular and Eletronic Structures of Small Molecules for Pharmacological and Environment Applications", vigência 01/06/1999 a 30/08/2003, Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano.
3. FAPESP - Auxílio Pesquisa - Regular, Processo 01/05819-0, R\$37.706,00 + US\$15.923,01, "Cristalografia estrutural como ferramenta na avaliação de ligações DPl-S; de mecanismos de reação de complexos contendo a unidade [RU-NO] diante de TIOIS e na identificação de complexos tetrameros de RU (II)", vigência 01/10/2001 a 30/09/2002, Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano.
4. CNPq/CONICET - Auxílio Pesquisa - Cooperação Internacional Brasil/Argentina, Processo 910169/98-5, US\$3.000,00, "Aplicação de Métodos Cristalográficos por Difração de Raios X ao Estudo de Complexos de Ligantes Orgânicos com Ions Metálicos", vigência 01/08/1998 a 31/07/2003, Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano.
5. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Alexandre Suman de Araujo, Processo 01/10750-0, R\$5.148,00, vigência 01/06/2002 a 31/05/2005, Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano.
6. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, José Ricardo Sabino, Processo 99/07507-4, R\$17.892,00, vigência 01/10/1999 a 30/09/2003, Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano.
7. CAPES/COFECUB - Auxílio Pesquisa - Regular, Processo 249/99/01-II, R\$49.320,00, "Inibidores e Estudos Estruturais de Enzimas Implicadas nos Metabolismos de Glicose e Oxigênio: Possíveis Aplicações à Terapia da Doença de Chagas", vigência 01/01/1999 a 28/02/2003, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
8. FAPESP - Auxílio Pesquisa - CEPID, Processo 98/14138-2, R\$1.272.796,36 + US\$1.921.975,18, "Center for Structural Molecular Biotechnology", vigência 01/10/2000 a 30/09/2005, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
9. Howard Hughes Medical Institute - Auxílio Pesquisa - Regular, Processo HHMI#75197-554701, US\$306.000,00, "Structural Biology of Medically Important Proteins: Crystallography, Molecular Modeling and Drug Design", vigência 01/01/1997 a 31/12/2002, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
10. FINEP - Auxílio Pesquisa - PRONEX, Processo 76.97.1044.00, R\$332.975,00, "Núcleo de Excelência em Biologia Molecular Estrutural: Estrutura, Função e Aplicações de Moléculas de Interesse Biotecnológico", vigência 25/11/1997 a 09/11/2000, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
11. CNPq - Auxílio Pesquisa - PRONEX, Processo 661193/97-7, R\$217.319,86, "Núcleo de Excelência em Biologia Molecular Estrutural: Estrutura, Função e Aplicações de Moléculas de Interesse Biotecnológico", vigência 04/10/2000 a 24/11/2003, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
12. CNPq - Auxílio Pesquisa - PRONEX, Processo 466094/01-9, R\$150.705,14, "Núcleo de Excelência em Biologia Molecular Estrutural: Estrutura, Função e Aplicações de Moléculas de Interesse Biotecnológico", vigência 25/02/2002 a 24/08/2003, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
13. Recursos Complementares - Projeto Especial 1 (Contra partida de auxílio pesquisa FAPESP Proc. 98/14138-2) - Pró-Reitoria de Pesquisa da USP, Processo 2002.1.166663.1.6, R\$3.500,00, ano base 2002, Prof. Dr. Glaucius Oliva.

14. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Mestrado, Celina de Pieri, Processo 99/11837-0, R\$6.974,00, vigência 01/03/2000 a 28/02/2002, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
15. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Celina de Pieri, Processo 01/14240-6, R\$5.148,00, vigência 01/03/2002 a 28/02/2005, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
16. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Paulo Henrique Conaggin Godoi, Processo 98/05204-1, R\$24.264,00, vigência 01/05/1998 a 30/04/2002, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
17. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Paulo Sérgio Monzani, Processo 98/16378-0, R\$24.264,00, vigência 01/04/1999 a 31/03/2003, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
18. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Frederico Moraes Ferreira, Processo 99/12029-4, R\$17.892,00, vigência 01/07/2000 a 31/05/2004, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
19. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Márcio Silva, Processo 00/014709-1, R\$11.520,00, vigência 01/05/2001 a 30/04/2005, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
20. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Marcelo Santos Castilho, Processo 00/01688-6, R\$17.892,00, vigência 01/05/2000 a 31/05/2004, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
21. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Hamilton Barbosa Napolitano, Processo 01/00296-0, R\$17.892,00, vigência 01/08/2001 a 28/02/2005, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
22. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Claudia Aparecida Alves, Processo 01/09703-7, R\$5.148,00, vigência 01/11/2001 a 31/04/2004, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
23. FAPESP - Auxílio Pesquisa - Regular, Processo 99/07150-9, R\$1.100.692,41 + US\$886.989,26, "Wiggler mad beamline for structural molecular biology", vigência 01/04/2002 a 31/03/2005, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
24. CNPq - Auxílio Pesquisa - Regular, Processo 480119/00-7, R\$22.000,00, "Estudo Estrutura - Função de Proteínas do Papilomavírus", vigência 21/11/2000 a 21/11/2002, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
25. FAPESP - Auxílio Pesquisa - Pesquisador Visitante Exterior, Processo 00/01485-8, R\$2.475,00 + US\$150,00 + 01 passagem Chalottesville/São Paulo/Charlottesville, "Professor Visitante Yancho Devedjiev University of Virginia", 04 a 18/09/2002, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
26. FAPESP - Auxílio Pesquisa - Temático, Processo 99/03387-4, R\$517.213,69 + US\$484.428,35, "Estudos Estruturais de Proteínas usando Luz Síncrotron", 01/10/1999 a 30/09/2004, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
27. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Mário Sanches Matilde Junior, Processo 00/03674-2, R\$11.520,00, vigência 01/08/2000 a 31/07/2004, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
28. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Ricardo Aparício, Processo 98/06761-1, R\$17.892,00, vigência 01/01/1999 a 28/02/2003, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
29. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Sandra Krauchenco, Processo 99/04497-8, R\$24.264,00, vigência 01/09/1999 a 31/08/2003, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
30. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Sandra Martha Gomes Dias, Processo 00/00021-8, R\$17.892,00, vigência 01/04/2000 a 31/03/2004, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
31. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado Direto, Adriana Lucely Rojas, Processo 01/07014-0, R\$3.708,00, vigência 01/03/2002 a 28/02/2005, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
32. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Marcos Román Calgaro, Processo 02/05329-6, R\$5.148,00, vigência 01/09/2002 a 31/08/2005, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
33. CNPq - Auxílio Pesquisa - Regular, Processo 478127/2001-4, R\$ 10.000,00, "Cristalização e Caracterização das Glucose 6 Fosfato Isomerases de Trypanosomatidae e Humanos", vigência 30/10/2001 a 30/10/2003, Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann.
34. Organização Mundial da Saúde - Auxílio Pesquisa - Regular, Processo ID940854, US\$ 10.000,00, "Structural approach in search for novel targets for chemotherapy based on the Leishmania major genome project", vigência 01/11/2001 a 31/10/2002, Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann.
35. FAPESP - Auxílio Pesquisa - Genoma, Processo 99/02874-9, R\$140.632,25+ US\$186.737,26, "The Sugarcane Est Project", vigência 01/06/1999 a 31/05/2002, Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann.
36. FAPESP - Auxílio Pesquisa - Genoma, Processo 00/07439-8, R\$15.750,00, "Purine Synthesis Pathway and Identification of Novel Genes", vigência 01/08/2000 a 31/07/2002, Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann.
37. FAPESP - Auxílio Pesquisa - Jovem Pesquisador, Processo 98/14979-7, R\$102.959,47+ US\$116.773,67, "Aplicação dos Princípios de Evolução in Vitro em Estudos de Função e Estrutura da Hipoxantina-Guanina-Fosforribosil-Transferase de Leishmania Tarentolae", vigência 01/04/1999 a 31/03/2004, Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann.
38. BIOMM/BIOBRÁS e FAFQ - Contrato de Pesquisa, R\$40.000,00, "Desenvolvimento de Sistema de expressão heteróloga em eschirichi coli da carboxipeptidases B de Sus scrofa (suino)", vigência 01/10/2001 a 30/09/2002, Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann.
39. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Luiz Marcelo Eugênio, Processo 00/14734-6, R\$5.148,00, vigência 01/10/2001 a 31/10/2002, Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann.
40. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Artur Torres Cordeiro, Processo 00/14960-6, R\$11.520,00, vigência 01/09/2001 a 31/08/2004, Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann.
41. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Monique Mantovani, Processo 01/10216-3, R\$5.148,00, vigência 01/04/2002 a 31/03/2005, Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann.
42. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado Direto, Ney Ribeiro Leite, Processo 02/01883-9, R\$3.492,00, vigência 01/06/2002 a 28/02/2006, Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann.
43. Recursos Complementares - Projeto Especial 1 (Contra partida de auxílio pesquisa PRONEX/FINEP Proc. 76.97.1044.00) - Pró-Reitoria de Pesquisa da USP, Processo 2001.1.8600.1.8, R\$3.500,00, ano base 2001 (aprovado na reunião de 21/02/2002), Prof.Dr.Richard Charles Garratt.
44. Pró-Reitoria de Pesquisa da USP - Taxa de inscrição no curso "A dinâmica da inovação farmacêutica", R\$1.500,00, ano base 2002, Prof.Dr.Richard Charles Garratt.
45. FINEP/FNDCT - Auxílio Pesquisa - Verde Amarelo, Processo 21.01.0492.00, R\$696.098,40, "Planejamento, Síntese e Avaliação Farmacológica de Novas Entidades Químicas, Inibidores Seletivos de Prostaglandina-H Sintase-2", vigência 18/12/2001 a 30/12/2003, Prof.Dr.Richard Charles Garratt.
46. EUROFARMA/FINEP/FAFQ (Contra partida de auxílio pesquisa FINEP/FNDCT Proc. 21.01.0492.00), Protocolo 01/2001/70, R\$175.774,60, "Planejamento, Síntese e Avaliação Farmacológica de Novas Entidades Químicas, Inibidores Seletivos de Prostaglandina-H Sintase-2", vigência 02/04/2002 a 01/08/2003, Prof.Dr.Richard Charles Garratt.
47. CNPq - Auxílio Pesquisa - Regular, Processo 480006/02-4, R\$37.300,00, "Curso: Biologia Estrutural e Modelagem de Fármacos, realizado de 01 a 12/07/2002, no âmbito do Centro Brasileiro Argentino de Biotecnologia", vigência 04/07/2002 a 03/01/2003, Prof.Dr.Richard Charles Garratt.
48. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Rosa Maria Fernandes Cardoso, Processo 98/06307-9, R\$18.119,01, vigência 01/08/1998 a 31/07/2001 e 01/11/01 a 31/07/2002, Prof.Dr.Richard Charles Garratt.
49. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Humberto d'Muniz Pereira, Processo 99/09304-3, R\$17.892,00, vigência 01/12/1999 a 30/11/2003, Prof.Dr.Richard Charles Garratt.
50. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Mestrado, André Luis Berteli Ambrosio, Processo 00/14959-8, R\$4.007,00, vigência 01/04/2001 a 10/03/2003, Prof. Dr.Richard Charles Garratt.
51. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Marcos Vicente de Albuquerque Salles Navarro, Processo 01/14239-8, R\$3.492,00, vigência 01/03/2002 a 28/02/2006, Prof. Dr.Richard Charles Garratt.
52. FAPESP - Reserva Técnica de Bolsa - Doutorado, Wânus José Garcia da Silva, Processo 01/00777-8, R\$5.148,00, vigência 01/03/2002 a 29/02/2004, Prof. Dr.Richard Charles Garratt.
53. CNPq - Auxílio Pesquisa - PADCT, Processo 620007/98-2 PADCT III / SFA, R\$ 226.070,64, "RXENZCS - Aplicação de Raios X e Neutrons em Materiais Zeolíticos, Cerâmicos Ferrolétricos e Solos Expansivos", vigência 01/04/1998 a 01/06/2003, Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas.
54. FAPESP - Auxílio Pesquisa - Programa Especial de Apoio ao Ensino de Segundo Grau, Processo 00/15044-3, R\$96.192,00, "Desenvolvimento e avaliação de uma pedagogia universitária participativa no ensino médio: atividades com ênfase em matemática, ciências e comunicação", vigência 01/01/2002 a 31/12/2004, Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas.
55. FAPESP - Auxílio Pesquisa - Regular, Processo 01/07545-5, R\$77.694,11 + US\$71.452,47, "Structural Studies of the Enzymes Involved in the Biosynthesis of the Exopolysaccharide, Xylellan gum, produced by Xylella fastidiosa", vigência 01/10/2001 a 30/09/2003, Dra. Dulce Helena Ferreira de Souza.
56. Recursos Complementares - Projeto Especial 1 (Contra partida de auxílio pesquisa FAPESP Proc. 01/07545-5) - Pró-Reitoria de Pesquisa da USP, Processo 2002.1.20421.1.3, R\$3.500,00, ano base 2002, Dra. Dulce Helena Ferreira de Souza.
57. FAPESP - Auxílio Pesquisa - Jovem Pesquisador, Processo 02/03144-9, R\$ 36.500,00, "Estudo das relações quantitativas entre a estrutura e a atividade de inibidores da purina nucleosídeo fosforilase de Schistosoma mansoni da gliceraldeído-3-fosfato desidrogenase glicosossomal de Trypanosoma cruzi e da Adenina-Fosforribosil-Transferase de leishmania tarentolae", vigência 01/11/2002 a 30/10/2006, Dr. Adriano Defini Andricopulo.

Bolsas Produtividade em Pesquisa

1. **Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano**, PQ, Nível 1A, 01/08/2000 a 31/07/2003, CNPq, Proc. 304499/77-3, "Aplicação de Métodos Cristalográficos por Difração de Raios X a Problemas Físicos, Químicos e Biológicos".
2. **Prof. Dr. Glaucius Oliva**, PQ, Nível 1A, 01/03/2001 a 28/02/2004, CNPq, Proc. 300236/90-5, "Cristalografia de Proteínas: Análise Estrutural de Proteínas de Interesse Biotecnológico".
3. **Prof. Dr. Igor Polikarpov**, PQ, Nível 1C, 30/03/2000 a 28/02/03, CNPq, Proc. 300220/96-0 Cristalografia de proteínas com luz síncrotron
4. **Prof. Dr. Richard Charles Garratt**, PQ, Nível 1C, 01/03/2000 a 28/02/2003, CNPq, Proc. 300714/93-9, "Estudos Estruturais de Proteínas de Suas Aplicações".
5. **Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas**, PQ, Nível 1A, 01/08/2001 a 31/07/2004, CNPq, Proc. 300365/90-0, "Análise Estrutural de Materiais".
6. **Prof. Otavio Henrique Thiemann**, PQ, Nível 2C, 01/03/02 a 28/02/04, CNPq, Proc. 300852/01-0 (NV), "Estudo estruturais, moleculares e filogenéticos de enzimas das vias de síntese de purinonucleotídeos e via glicolítica de kriptoplastida visando o desenho racional de drogas antiparasitárias".
7. **Dra. Dulce Helena Ferreira de Souza**, PQ, Nível 2C, 01/08/02 a 31/07/04, Proc. 520312/02-3, "Estudos Bioquímicos e Estruturais de macromoléculas com atividades biológicas".

D. Atividades Acadêmicas e de Extensão Universitária

Atividades Didáticas

Graduação

Prof. Dr. Glaucius Oliva

1. FFI 106 Laboratório de Física Geral III (1º semestre, 60).
2. FCM 104 Laboratório de Física Geral II (2º semestre, 60).

Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann

1. SLC 559 Biologia III (Anual, 120).
2. FFI 340 Princípios de Biologia Molecular (2º semestre, 30).

Prof. Dr. Richard Charles Garratt

1. FCM 103 Laboratório Física I (1º semestre, 60).
2. FFI180 Laboratório Física Geral I (1º semestre, 30).
3. FCM 104 Laboratório Física II (2º semestre, 60).

Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano

1. FFI 180 Laboratório Física Geral I (1º semestre, 90).
2. FFI181 Laboratório Física Geral II (2º semestre, 90).

Prof. Dr. Igor Polikarpov

1. FCM 101 Física I (1º semestre, 90).
2. FCM 102 Física I (2º semestre, 90).

Prof. Dr. Javier Alcides Ellena

1. SLC 543 Física I (2º semestre, 30).

Pós-Graduação

Prof. Dr. Glaucius Oliva

1. SFI 5848 – Planejamento Racional de Fármacos e Vacinas (2º semestre, 30).

Prof. Dr. Richard Charles Garratt

1. FFI 5841 – Estrutura e Função de Proteína (1º semestre, 36).
2. SFI 5855 – Tópicos em Física Biomolecular (1º semestre, 24).
3. SFI 5853 – Técnicas Físicas Aplicadas à Biologia - (2º semestre, 30).
4. SFI 5847 – Ressonância Magnética Nuclear Aplicada a Estudo de Biomoléculas (2º semestre, 36).

Prof. Dr. Igor Polikarpov

1. FFI 5850 – Radiação Síncrotron em Biologia Estrutural – (2º semestre, 30).

Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann

1. SFI 5849 – Purificação e Caracterização de Biomoléculas - (1º semestre, 36).
2. SFI 5855 – Tópicos em Física Biomolecular - (2º semestre, 24).

Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano

1. SFI 5852 – Simetria em Cristalografia – (1º semestre, 135).

Orientação Acadêmica e Bolsistas

Pós-Doutoramento

Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano

1. Javier Alcides Ellena, FAPESP, Proc. 97/14345-5, Cristalografia e Propriedades de Sólidos, Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano, 01/05/1998 a 30/04/2001-Renovada: 01/05/01 a 04/08/02, Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano.

Prof. Dr. Glaucius Oliva

1. Edson Roberto da Silva, FAPESP Bolsa Pós-Doutorado Proc. 01/05119-9, Estudo Estrutural das Enzimas Arginase e Fosforribosil Pirofosfato Sintetase I para Planejamento de Fármacos contra Leishmaniose, 01/11/01 a 01/08/02, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
2. Fernando Pavão, FAPESP Bolsa Pós-Doutorado Proc. 01/01255-5, Desenvolvimento de Drogas Anti-Inflamatórias pela Inibição Específica da Enzima Prostaglandina Endoperoxido Sintetase-2 (PGHS-2 ou COX-2), 01/06/2001 a 31/05/2003, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
3. Stéfano Trapani, FAPESP Bolsa Pós-Doutorado, Proc. 01/07798-0, Desenho racional de inibidores baseado em dados estruturais da enzima fosfoenolpiruvato carboxiquinase de tripanossoma cruzi, 01/11/01 a 30/04/03, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
4. Adriano Defini Andricopulo, FAPESP Bolsa de Jovem Pesquisador, Proc. 02/07691-4, Estudo das relações quantitativas entre a estrutura e a atividade de inibidores da purina nucleosídeo fosforilase de Schistosoma mansoni da gliceraldeído-3-fosfato desidrogenase glicossomal de Trypanosoma cruzi e da Adenina-Fosforribosil-Transferase de leishmania tarentolae, 01/11/02 a 30/10/03, Prof. Dr. Glaucius Oliva.

Prof. Dr. Richard Charles Garratt

1. Carlos Henrique Tomich de Paula da Silva, FAPESP, Proc. 99/09193-7, "Planejamento Racional de Drogas Baseado em Estrutura: Aplicação as Enzimas Gapdh de T. Cruzi, Aprt de Leishmania Tarentolae e Sod de S. Mansoni, 01/01/2000 a 31/12/2003, Prof. Dr. Richard Charles Garratt.
2. Maria Teresa da Silva, Comunidade Européia, Pós-doutorado, Proc. INCO/DEV ICA4-CT-2001-10075, Projeto: "Development of lead compounds for trypanocidal drugs based on inhibitors targeted against parasite glycolysis" "Development of lead compounds for trypanocidal drugs based on inhibitors targeted against parasite glycolysis", 01/12/01 a 31/05/03, Prof. Dr. Richard Charles Garratt.
3. Raquel Kely Bortoleto Bugs, FAPESP, Proc. 01/13917-2, "Estudos Estruturais da FE-Superoxido Desmutase Citosólica de Plasmodium Falciparum, Uma Enzima-alvo para o planejamento racional de drogas contra a malária", 01/01/2002 a 31/12/03, Prof. Dr. Richard Charles Garratt.
4. Claudia Elisabeth Munte, FAPESP, Proc. 02/06552-0, "Estrutura de proteínas de organismo patogênicos determinadas por ressonância magnética nuclear de alta resolução", 01/10/2002 a 30/09/03, Prof. Dr. Richard Charles Garratt.

Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas

1. Antonio Carlos Doriguetto, CNPq/PADCT, Proc. 62.0007/98-2 PADCT III / SFA, "Aplicação de Raios X e Neutrons em Materiais Zeolíticos, cerâmicos Ferroelétricos e Solos Expansivos", 01.05.2000 a 30.10.2001 e bolsa FAPESP, Proc. 01/06993-4, "Caracterização Química e Estrutural de Materiais Ferroelétricos", 01/11/01 a 31/10/02, Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas.
2. Ademir Geraldo Cavallari Costalonga, PADCT/CNPq, "Aplicação de Raios X e Neutrons em Materiais Zeolíticos, cerâmicos Ferroelétricos e Solos Expansivos", Proc. 62.0007/98-2 PADCT III / SFA, 01/11/2001 a 31/10/2002, Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas.
3. Mirta Mir Caraballo, CNPq / CLAF, "Análise estrutural de materiais por difração de raios-X", 11/2002 a 30/09/2003, Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas.

Dra. Dulce Helena Ferreira de Sousa

1. Renata Krogh Andricopulo, FAPESP Proc.02/03179-7, Estudos cristalográficos e cinéticos de enzimas envolvidas na biossíntese da goma fastidiana, produzida pela Xylella fastidiosa, 01/11/02 a 31/10/03, Dra. Dulce Helena Ferreira de Sousa / Glaucius Oliva.

Doutoramento **Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano**

1. José Ricardo Sabino, "Determinação Experimental da Densidade de Carga Eletrônica de Substâncias de Interesse Biológico", FAPESP, Proc. 99/07508-0, 01/10/1999 a 30/09/2003, Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano.
2. Sauli dos Santos Jr., "Estudos Conformacionais por Difração de Raio-X em Monocristais de Compostos de Interesse Farmacológico e Estudo Comparativo de Vários Métodos de Correção do Fator de Absorção Aplicáveis a estes Compostos", CNPq, Proc. 140652/1999-0, 14/07/1999 a 14/07/2004, Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano.
3. Alexandre Suman de Araujo, "Estudo do processo de complexação de calixarenos com ions metálicos por métodos de dinâmica molecular", Processo 01/10750-0, 01/06/2002 a 31/05/2005, Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano.

 Prof. Dr. Glaucius Oliva

1. Paulo Henrique Conaggin Godoi, "Estrutura Cristalográfica da Proteína Thil, Produto de um Gene de Arabidopsis Thaliana Envolvido Na Biossíntese De Tiamina E No Reparo De Lesões De DNA", FAPESP, Proc. 97/14359-6, 01/05/98 a 02/09/02, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
2. Paulo Sérgio Monzani, "Otimização da Expressão Recombinante e Estudos Funcionais e Estruturais do Produto do Gene Dscr-1 Humano, Relacionado com a Síndrome de Down", FAPESP, Proc. 98/16378-0, 01/04/99 a 31/03/2003, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
3. Marcelo Santos Castilho, "Planejamento racional de Fármacos contr Tripanossomatídeos: GGAPDH de T. Cruzi e XPR1 de L. Tantalae", FAPESP Bolsa de Doutorado, Proc. 00/01688-6, 01/05/2000 a 31/03/2004, Prof. Dr. Glaucius Oliva,
4. Frederico Moraes Ferreira, "Estrutura Cristalográfica da N-Acetilglicosamina 6-fosfato Desacetilase, uma Proteína da Via Catabólica de Açúcares Aminoácidos da Escherichia Coli", FAPESP Bolsa Doutorado Proc. 99/12029-4, 01/06/00 a 31/05/2004, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
5. Hamilton Napolitano, "Estudos Estruturais da Fosforibosil Pirofosfato Sintetase (PRS) Humana" - FAPESP Bolsa de Doutorado Proc. 01/00296-0, 01/08/2001 a 28/02/2005, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
6. Márcio Silva, "Estudos Estruturais da Adenina-Fosforibosil-Transferase (APRT) de (Leishmania Tarentolae)" - FAPESP Bolsa de Doutorado, Proc. 00/014709-1, 01/05/2001 a 30/04/2005, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
7. Claudia Aparecida Alves, co-orientadora: Dulce Helena Ferreira, "Estudos Estruturais de duas enzimas envolvidas na biossíntese de goma xilelana produzida pela bactéria Xylella Fastidiosa", FAPESP Bolsa de Doutorado Proc. 01/09703-7, 01/04/2002 a 31/03/2005, Prof. Dr. Glaucius Oliva,
8. Rodrigo Villares Portugal, "Efeitos de Campos Magnéticos Estáticos no Processo de Enovelamento de Proteínas", CAPES Bolsa de Doutorado, 01/04/02 a 01/02/06, Prof. Dr. Glaucius Oliva,
9. Celina de Pieri, "Estudos estruturais de duas enzimas (GUM e GUMD) envolvidas na via biossintética da goma fastidiana produzida pela Xilella Fastidiosa", FAPESP Proc. 01/14240-6, 01/03/02 a 28/02/05, Prof. Dr. Glaucius Oliva.

 Prof. Dr. Igor Polikarpov

1. Fábio Macêdo Nunes, "Estudos Estruturais das Isoformas Alfa 1 e Alfa 2 do Receptor do Hormônio Tireoideano Produzidas através de Splicing Alternativo de RNA", CNPq, Proc. 141924/01-2, (veio do LNLS), 1/9/2001 a 31/08/05, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
2. Mário Sanches Matilde Jr., "Cristalografia de Raios X de Proteases de HIVS e seus Complexos com Inibidores", FAPESP, 00/03674-2, (veio do LNLS), 1/8/2000 a 31/07/04, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
3. Sandra Martha Gomes Dias, "Estudos de Raios-X dos Receptores dos Hormônios Tireoideanos", FAPESP, Proc. 00/00021-8, (veio do LNLS), 1/4/2000 a 31/03/04, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
4. Adriana Lucely Rojas Cardona, "Estudos Estruturais de Carbohidrases de Fungos", FAPESP Bolsa Doutorado Direto, Proc. 01/07014-0, (veio do LNLS), 01/03/2002 a 28/02/2005, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
5. Ricardo Aparício, "Determinação da estrutura cristalográfica da Beta-manosidase de Trichoderma Reeseli", FAPESP, 98/06761-1, Prof. Dr. Igor Polikarpov, 01/01/1999 a 26/02/03 (veio do LNLS), Unicamp, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
6. Sandra Krauchenco, "Estudos Cristalográficos do Inibidor de Proteases Extraído das Sementes de Copaifeira Langsdorffii", FAPESP, 99/04497-8, 1/9/1999 a 31/08/03, (veio do LNLS), Unicamp, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
7. Marcos Román Calgaro, "Expressão, purificação e estudos estruturais do receptor X do pregnano (PXR)", FAPESP Proc. 02/05329-6, Prof. Dr. Igor Polikarpov, 01/09/2002 a 31/08/2005, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
8. Hannes Fischer, "Conformações estruturais de proteínas estudadas através da técnica de espalhamento de raios X a baixo ângulo", 01/03/2000 a 29/2/2004, Orientador Aldo Craievich, Co-orientador Prof. Dr. Igor Polikarpov.

 Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann

1. Artur Torres Cordeiro, "Estudos Estruturais e Comparativos da Enzima Glicosil 6-Fosfato Isomerase de Humano e de Leishmania Mexicana", FAPESP Bolsa Doutorado Proc. 98/15285-9, 01/09/2001 a 31/08/2004, Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann.
2. Luiz Marcelo Eugênio, "Estudos Estruturais e comparativos da enzima glicosil 6-fosfato isomerase de kinetoplastidae", FAPESP Bolsa Doutorado, Proc. 00/14734-6, 01/10/01 a 31/10/02, Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann.
3. Monique Mantovani, "Caracterização molecular de enzimas envolvidas na via de reciclagem de purino-nucleotídeos de Leishmania major." 01/11/2001 a 31/03/2002 (Bolsa CNPq) e (Bolsa FAPESP Proc.01/10216-3) 01/04/02 a 31/03/2005, Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann.
4. Ney Ribeiro Leite, "Estudos moleculares das triptofanil-tRNA-sintetases mitocondrias humana e de Leishmania", FAPESP Bolsa Doutorado Direto, Proc: 02/01883-9, 01/06/02 a 28/02/2006, Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann.

 Prof. Dr. Richard Charles Garratt

1. Humberto De Muniz Pereira, "Estudos Estruturais e Cinéticos da Enzima Purina Nucleosídeo Fosforilase de Schistosoma Mansoni", FAPESP, Proc. 99/09304-3, 01/12/1999 a 30/11/2003, Prof. Dr. Richard Charles Garratt.
2. Marcos Roberto Bonfadini, "Estudos Estruturais da Endopeptidase Específica para Glutamato de Bacillus Licheniformis", CNPq, Proc. 571733/1997-2, 01/04/1998 a 28/02/2002, Prof. Dr. Richard Charles Garratt.
3. Rosa Maria Fernandes Cardoso, FAPESP, Proc. 98/06307-9, "Estudos Estruturais da Cu, Zn-Superoxido Desmutase Citosólica de Schistosoma Mansoni, uma Enzima-Alvo para o Planejamento Racional de Drogas Contra Esquistossomose", 01.08.98 a 10/08/2000 - Bolsa sanduiche CNPq Doutorado USA de 10.08.2000 a 10.08.2001 e "Estudos Estruturais de Enzimas Antioxidantes Complexadas com Inibidores e Planejamento Racional de Drogas Contra a Esquistossomose", Bolsa FAPESP reativada de 01/11/01 a 06/09/02, Prof. Dr. Richard Charles Garratt.
4. Wânus José Garcia da Silva, Doutorado, "Estudos Estruturais das proteínas Bradeiona-Alfa e Beta: Moléculas Relacionadas com o Desenvolvimento do Câncer do Cólon, Reto e Melanoma Maligno, Prof. Dr. Richard Charles Garratt CAPES Bolsa Doutorado, 01/03/2001 a 28/02/02 e Bolsa FAPESP de 01/03/02 a 29/02/04, Prof. Richard Charles Garratt.
5. Marcos Vicente de A. S. Navarro, Doutorado, "Estudos Estruturais da FE-Superoxido dismutase citosólica de trypanossoma cruzi, uma enzima-alvo para o planejamento racional de drogas contra a doença de chagas", FAPESP Bolsa Doutorado Direto, Proc. 01/14239-8, Prof. Dr. Richard Charles Garratt, 01/03/2002 a 28/02/2006, Prof. Richard Charles Garratt.

Mestrado **Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano**

1. Alexandre Suman de Araújo, Mestrado, "Determinação de Estruturas Moleculares Cristalinas por Difração de Raios-X e Desenvolvimento de um Sistema Computacional para a Comparação de Fragmentos Moleculares de Configuração Similar", FAPESP, Proc. 99/07507-4, 01.10.1999 a 18/03/02, Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano.

 Prof. Dr. Javier Alcides Ellena

1. Márcio Boer Ribeiro, Mestrado, "Análise Estatística de Interações entre metais Pesados e Compostos Orgânicos com o uso das bases de Dados Cambridge Structural Database", CNPq Institucional, 01/03/00 a 27/06/02.

 Prof. Dr. Glaucius Oliva

1. Celina de Pieri, Mestrado, "Expressão, Purificação e Cristalização da Enzima Glicosiltransferase I Envolvida na Biossíntese de Goma Xilelana Produzida pela Bactéria Xylella Fastidiosa", FAPESP, Proc. 99/11837-0, 01/03/2000 a 24/06/02, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
2. João Renato Carvalho Muniz, Mestrado, Aplicação da Bioinformática no estudo dos genes e enzimas envolvidas na síntese da goma xilelana produzida pela bactéria "Xylella Fastidiosa", Bolsa de Mestrado CAPES, 01/03/2001 a 28/02/2003, Prof. Dr. Glaucius Oliva (Co-orientadora: Dulce Helena Ferreira de Souza).

 Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann

1. Susana Sculaccio, Mestrado, Caracterização molecular das fosforibosil-transferases (APRT) identificadas no Projeto Genoma da Cana-de-Açúcar, Técnica nível médio IFSC, 01/02/00 a 22/11/02, Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann.
2. Elisandra Márcia Rodrigues, Mestrado, "Clonagem, Expressão e Caracterização Molecular de Fosforibosil Pirofosfato sintetases (PRS) Humanas", CNPq Bolsa Mestrado, 19/02/2002 a 19/08/2005, Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann.

Prof. Dr. Richard Charles Garratt

1. Antonio Joaquim da Silva Neto, Mestrado, "Determinação da Estrutura das Proteínas RhoA e ZnFinger do Schistosoma Mansoni", CNPq, 01/03/2000 a 18/12/02, Prof. Dr. Richard Charles Garratt.
2. André Luís Berteli Ambrósio, FAPESP, Mestrado, "Estudo da Interação de Ácidos Graxos com Lys-49 fosfolípases A2 por difração de raios X e Ressonância Magnética Nuclear", 01/04/2001 a 31/03/2003, Prof. Dr. Richard Charles Garratt.
3. Daniel Ferreira Silva, Mestrado, sem bolsa, Estudos estruturais por RMN de peptídeos oriundos do peptídeo C da insulina, sem bolsa, 12/07/02 a 12/07/04, Prof. Dr. Richard Charles Garratt.

Iniciação Científica

Prof. Dr. Glaucius Oliva

1. Lucas Larcher Caliri, "Planejamento Racional de Inibidores Específicos da Enzima Humana "Glicose-6-Fosfato Isomerase", FAPESP, Proc. 00/14962-9, 01/04/01 a 31/03/02, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
2. Ivan Silvestre Paganini Marin, "Clonagem e Caracterização da XPRT de Leishmania major", Prof. Dr. Glaucius Oliva, CNPQ/Pibic, 01/08/2001 a 31/07/02, Prof. Dr. Glaucius Oliva.

Prof. Dr. Igor Polikarpov

1. Luana de Freitas Nascimento, "Refinamento e análise estrutural do domínio C-terminal da proteína E2 do Papillomavirus", Bolsista de Iniciação Científica FAPESP Proc. 01/01580-3, 01/03/01 a 28/02/03, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
2. Ricardo de Paula Nicoluci, "Desenvolvimento de pesquisas e estudos pertinentes a atividade do Projeto 218". Bolsista de Iniciação Científica FUSP-Fundação de Apoio à USP/Pró-Reitoria de Pesquisa, Períodos: 01/11/01 a 30/10/2002; renovada 19/02/03 a 19/02/04, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
3. Ana Carolina Migliorini Figueira, "Estudos de dimerização dos receptores dos hormônios tireóideos", Bolsista de Iniciação Científica FAPESP, Proc.02/02503-5, 01/05/02 a 30/04/03, Prof. Dr. Igor Polikarpov.

Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann

1. Alécio A. P. Junior, "Rho1 (ToRho1) de Trypanosoma cruzi. Estudos visando à determinação estrutural da enzima ToRHO1" (01/03/02 a 30/06/02-Sem bolsa) e bolsa FAPESP Proc. 02/03916-1 de 01/07/02 a 30/06/03, Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann.
2. Franciani Cássia Sentanini, "Expressão e purificação da enzima glicose 6 fosfato isomerase", SEM BOLSA, 01/11/2002 a 01/11/2003.

Prof. Dr. Richard Charles Garratt

1. Ana Carolina de Sousa Silva, "Expressão, Purificação e Cristalização da Fração Proteolítica da Proteína Ns3 do Vírus da Febre Amarela", CNPq/PIBIC, 01.08.2000 a 28.02.2002 e Bolsa FAPESP Proc. 01/13446-0, 01/03/02 a 31/12/03, Prof. Dr. Richard Charles Garratt.
2. Marcos Vicente de Albuquerque Salles Navarro, "Estudos Estruturais da Fe-Superóxido Desmutase Citosólica de Trypanosoma cruzi, uma Enzima-Alvo para o Planejamento Racional de Drogas Contra a Doença de Chagas", FAPESP, 01/04/2001 a 31/03/2002, Prof. Dr. Richard Charles Garratt.

Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas

1. Luiz Paulo Lopes, "RXENZCS - Aplicação de Raios X E Neutrons em Materiais Zeolíticos, Cerâmicos Ferroelétricos e Solos Expansivos", CNPq, Proc. 62.0007/98-2 PADCT III / SFA, 01/05/2000 a 01/06/2002, Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas.
2. Walcinyr Bragatto Neto, "RXENZCS - Aplicação De Raios X e Neutrons em Materiais Zeolíticos, Cerâmicos Ferroelétricos e Solos Expansivos", CNPq, Proc. 62.0007/98-2 PADCT III / SFA, 01/05/2000 a 01/06/2002, Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas.

Dra. Dulce Helena Ferreira de Souza - Glaucius Oliva

1. Carlos Eduardo Desuó, "Clonagem do gene gumB e expressão da GumB, enzima produzida pela X.fastidiosa, envolvida na via biosintética da goma fastidiana (Rede de Biologia Molecular Estrutural – SMOLBnet", CNPq, 01/08/02 a 31/10/02., Dra. Dulce Helena Ferreira de Souza.
2. Carlos Eduardo Desuó, "Clonagem do gene gumB e expressão da GumB, enzima produzida pela X. fastidiosa, envolvida na via biosintética da goma fastidiana (Rede de Biologia Molecular Estrutural – SMOLBnet", FAPESP Proc. 02/08172-0, 01/11/02 a 31/10/03, Dra. Dulce Helena Ferreira de Souza.
3. Bárbara Daniela Guedes, "Clonagem do gene gumB e expressão da GumB, enzima produzida pela X.fastidiosa, envolvida na via biosintética da goma fastidiana (Rede de Biologia Molecular Estrutural – SMOLBnet", CNPq, Proc. 520312/2000-2-3, 01/09/02 a 31/08/04, Dra. Dulce Helena Ferreira de Souza.

Dr. Fernando Pavão - Glaucius Oliva

1. Juliana Ribeiro Gabriel, "Desenvolvimento de drogas anti-inflamatórias pela inibição específica da enzima prostaglandina endoperoxíase-2 (PGHS-2 ou COX-2)", sem bolsa, 01/10/01 a 06/2002, Dr. Fernando Pavão.

Bolsa de Treinamento Técnico

Prof. Dr. Glaucius Oliva

1. Scheilla de Andrade Vieira, Centro de Biotecnologia Molecular Estrutural CBME, CEPID, FAPESP, FAPESP Bolsa TT-III, Proc. 02/07697-2, 01/09/02 a 31/08/03, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
2. Eli Fernando Pimenta, Centro de Biotecnologia Molecular Estrutural-CBME, CEPID, FAPESP, FAPESP Bolsa de TT-I, Proc. 02/10409-9, 01/11/02 a 31/10/03, Prof. Dr. Glaucius Oliva.

Prof. Dr. Igor Polikarpov

1. Marcos Rogério de Sousa, "Apoio técnico ao laboratório de cristalização de proteínas do IFSC/USP", FAPESP Bolsa TT-II, Proc. 02/02861-9, 01/06/02 a 30/09/02, Prof. Dr. Igor Polikarpov.
2. Huita do Couto Matozo, "Estudos Estruturais de Proteínas Usando Luz Síncrotron", FAPESP, Bolsa TT-II, Proc. 02/08751-0, 01/01/03 a 30/09/03, Prof. Dr. Igor Polikarpov.

Teses e Dissertações Concluídas por Docentes e Alunos

Doutorado

Prof. Dr. Glaucius Oliva

1. Paulo Henrique Conaggin Godoi, Estrutura cristalográfica da proteína Thi1 de Arabidopsis thaliana, FAPESP, IQSC/USP, 02/09/02.

Prof. Dr. Richard Charles Garratt

1. Rosa Maria Fernandes Cardoso, "Estudos estruturais de enzimas antioxidantes relacionadas à doença de Lou Gehring e à esquistossomose", IQSC/USP, 06/09/02.

Mestrado

Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano

1. Alexandre Suman de Araujo, Determinação de estruturas moleculares cristalinas por difração de raio-x e desenvolvimento de um sistema computacional para a comparação de fragmentos moleculares de configuração similar, IFSC/USP, 18/03/2002.

Prof. Dr. Glaucius Oliva

1. Celina de Pieri, Expressão, purificação e caracterização das enzimas Gum D e Gum C, envolvidas na biossíntese do exopolissacarídeo produzido pela bactéria Xylella fastidiosa, 24/06/2002.

Prof. Dr. Javier Alcides Ellena

1. Márcio Boer Ribeiro, Análise estática das interações do rutênio com complexos orgânicos", 27/06/02, IFSC/USP.

Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann

1. Susana Andréa Sculaccio, Clonagem e caracterização molecular da Fosforribosil Pirofosfato Sintase (PRPP) de Cana-de-açúcar. 22/11/02.

Prof. Dr. Richard Charles Garratt

1. Antônio Joaquim da Silva Neto, Expressão, Purificação e Modelagem Molecular da Proteína SmRho de Schistosoma mansoni, IFSC/USP, 18/12/02.

Participação em Comissões Julgadoras no IFSC

Exame de Qualificação

1. Prof. Dr. Glaucius Oliva, participou da Comissão Julgadora do Exame Geral de Qualificação, em nível de Doutorado de Ildeberto Aparecido Rodello, "Um ambiente virtual colaborativo para visualização e análise de moléculas de proteínas", IFSC/USP, São Carlos, SP, 19/08/02.
2. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou da Comissão Julgadora do Exame Geral de Qualificação de Doutorado de Ildeberto Aparecido Rodello, "Um ambiente virtual colaborativo para visualização e análise de moléculas de proteínas", IFSC/USP, São Carlos, SP, 19/08/02.
3. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou da Comissão Julgadora do exame geral de qualificação de doutorado de Cláudia Adriana de Souza Melo, "Photodynamic effect on câncer influenced by electromagnetic field", IFSC/USP, São Carlos, SP, 20/12/02.

Dissertação de Mestrado

1. Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano, orientador, participou da comissão julgadora da dissertação de Mestrado de Alexandre Suman de Araújo, "Determinação de estruturas moleculares cristalinas por difração de raios X e desenvolvimento de um Sistema computacional para a comparação de fragmentos moleculares de configuração similar", no IFSC/USP, São Carlos, SP, Mestrado, 18/03/02.
2. Prof. Dr. Glaucius Oliva, orientador, participou da comissão julgadora da dissertação de Mestrado de Celina Di Pieri, "Expressão, purificação e caracterização das enzimas Gum D e Gum C, envolvidas na biossíntese do oxopolissacarídeo produzido pela bactéria Xylella fastidiosa", IFSC/USP, São Carlos, SP, Mestrado, 24/06/02.
3. Prof. Dr. Igor Polikarpov, participou da comissão julgadora da dissertação de Mestrado de Alexandre Suman de Araújo, "Determinação de estruturas moleculares cristalinas por difração de raios X e desenvolvimento de um Sistema computacional para a comparação de fragmentos moleculares de configuração similar", IFSC/USP, São Carlos, SP, Mestrado, 18/03/02.
4. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou da comissão julgadora da dissertação de Mestrado de Alexandre Suman de Araújo, Título: Determinação de estruturas moleculares cristalinas por difração de raios X e desenvolvimento de um Sistema computacional para a comparação de fragmentos moleculares de configuração similar, IFSC/USP, São Carlos, Mestrado, 18/03/02.
5. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, orientador, participou da comissão julgadora da dissertação de Mestrado de Antônio Joaquim da Silva Neto, Título: Expressão, Purificação e Modelagem Molecular da Proteína SmRho de Schistosoma mansoni, no IFSC/USP, São Carlos, SP, Mestrado, 18/12/02.

Tese de Doutorado

1. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou da comissão julgadora da tese de doutorado de Ligia Braggion, Título: Uma simetria exata para a evolução do código genético mitocondrial, para obtenção do título de Doutor em Ciências e Engenharia de Materiais, no IFSC/USP, São Carlos, SP, Doutorado, 29/05/2002.

Livre-Docência

1. Prof. Dr. Glaucius Oliva, participou da comissão julgadora do concurso público de títulos e provas para obtenção do título de Livre-Docente de Igor Polikarpov, IFSC/USP, São Carlos, SP, 09 a 10/08/01.

Outros

1. Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano, participou da comissão julgadora do processo seletivo para contratação de um docente na categoria de Professor Doutor para atuar na área de Ressonância Magnética Experimental, junto ao Departamento de Física e Informática, no qual acham-se inscritos os Doutores: Bernd Uwe Foerster, José Fabian Schneider e Eduardo Ribeiro de Azevedo, IFSC/USP, 09/05/02.
2. Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas, participou da comissão de concurso para contratação de um docente para atuar na área de Cristalografia de Pequenas Moléculas, na categoria de Professor Doutor, Ref. MS-3, em RDIDP (Regime de Dedicção Integral à Docência e à Pesquisa), claro nº. 413.623, junto ao Departamento de Física e Informática, do IFSC/USP, 7-08/05/02.

Participação em Comissões Julgadoras Externas ao IFSC

Dissertação de Mestrado

1. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou da comissão julgadora da dissertação de mestrado de Susana Andréa Sculaccio, título "Clonagem e caracterização molecular da Fosforribosil Pirofosfato Sintase (PRPP) de Cana-de-açúcar", Área de Genética e Evolução, na Universidade Federal de São Carlos-UFSCar, SP, Mestrado, 22/11/02.
2. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou da comissão julgadora da dissertação de mestrado de Mônica Santiago Barbosa, intitulada: Caracterização de sequências codificantes para o antígeno gliceraldeído 3-fosfato desidrogenase do fungo patogênico humano paracoccidídeos brasiliensis, Instituto de Ciências Biológicas I, UFG, Goiânia, GO, Mestrado, 22/03/02.
3. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou da comissão julgadora da dissertação de mestrado de Marilena da Silva Peixoto, intitulada: Caracterização do gene que codifica a proteína Ribossomal lcrL27 em Tripanosomatídeos, Instituto de Química, UNESP, Araraquara, SP, Mestrado, 23/09/03.
4. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou da comissão julgadora da dissertação de mestrado de Andressa Patrícia Alves Pinto, intitulada "Structural characterization of a recombinant flagellar calcium binding protein from Trypanosoma cruzi", Centro de Ciências Biológicas e da Saúde, UFSCar, São Carlos, SP, Mestrado, 09/09/02.
5. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou da comissão julgadora da dissertação de mestrado de Clodoaldo Gibin Garcia, intitulada "Caracterização estrutural de dois complexos com ligantes orgânicos", Mestre em Ciências (Química Analítica), IQSC/USP, São Carlos, SP, Mestrado, 17/09/02.
6. Dra. Dulce Helena Ferreira de Souza, participou da comissão julgadora da defesa da dissertação de mestrado, Anemari Ramos Dinarte dos Santos, "Clonagem genômica e expressão do domínio toxina de uma RIP 2 de Abrus pulchellus", Centro de Ciências Biológicas e da Saúde, UFSCar, São Carlos, SP, Mestrado, 21/03/02.
7. Dra. Dulce Helena Ferreira de Souza, participou da comissão julgadora do exame de dissertação de mestrado de Raquel Agneli Mesquita, "Estudo da influência do treinamento físico sobre o remodelamento do músculo esquelético de rato", Centro de Ciências Biológicas e da Saúde, UFSCar, São Carlos, SP, Mestrado, 06/09/02.

Monografia

1. Prof. Dr. Igor Polikarpov, participou da comissão julgadora da apresentação da monografia da aluna Georgina Sabio Porto Mundin intitulada "Clonagem dos principais domínios de um receptor nuclear órfão – nor-1", licenciatura e bacharelado em ciências biológicas, centro de ciências biológicas e da saúde, UFSCar, São Carlos, SP, 05/09/02.
2. Dra. Dulce Helena Ferreira de Souza, participou da comissão julgadora da apresentação da monografia de Juliana Uema Ribeiro, intitulada "Purificação e caracterização de uma nova metaloprotease/desintegrina dimérica do veneno de bothrops alternatus", Centro de Ciências Biológicas e da Saúde, UFSCar, São Carlos, SP, 10/09/02.

Tese de Doutorado

1. Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano, participou da comissão julgadora da defesa da tese de doutorado de Paulo Henrique Conaggin Godoi, intitulada "Estrutura cristalográfica da proteína Thi1 de Arabidopsis thaliana", Doutor em Ciências (Físico-Química), IQSC/USP, São Carlos, SP, Doutorado, 02/09/02.
2. Prof. Dr. Glaucius Oliva, participou da comissão julgadora da defesa de tese de doutorado de Alvicler Magalhães, "Determinação da Estrutura Terciária dos Peptídeos Candidatos a Epitopos da Proteína SM14 Schistosoma Mansoni via RMN e Modelagem Molecular", Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia, Depto. Química, UFSCar, São Carlos, SP, Doutorado, 17/05/02.
3. Prof. Dr. Glaucius Oliva, Orientador, participou da comissão julgadora da tese de doutorado de Paulo Henrique Conaggin Godoi, "Estrutura cristalográfica da proteína Thi1 de Arabidopsis thaliana", Doutor em Ciências (Físico-Química), IQSC/USP, São Carlos, SP, Doutorado, 02/09/02.
4. Prof. Dr. Javier Alcides Ellena, participou da comissão julgadora da defesa de tese de doutorado de Edinaldo Teixeira, "Espectro vibracional e propriedades dielétricas do Na2ThF6", do Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, CE, Doutorado, 10/12/02.
5. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou da comissão julgadora da tese de doutorado de Sandra Cristina Pfister, intitulada: Localização intracelular de variantes da DSCR1–Uma proteína relacionada com a Síndrome de Down, DGE, UFSCar, São Carlos, SP, Doutorado, 12/04/02.
6. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou da comissão julgadora do exame de qualificação de doutorado de Daniella Tambasco Talhari, Candidate genes for growth traits in beef cattle crosses Bos taurus X Bos indicus, do Centro de Ciências Biológicas e da saúde, programa de pós-graduação em genética e evolução, UFSCar, São Carlos, SP, Doutorado, 05/12/02.

7. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou da comissão julgadora da tese de doutorado de Monica Rosas da Costa lemma, intitulada: Metaloproteases-desintegrinas de venenos de serpente: Purificação, expressão heteróloga e interação com a integrina $\alpha 2 \beta 1$, Centro de Ciências Biológicas e da Saúde, UFSCar, São Carlos, SP, Doutorado.
8. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, orientador, participou da comissão julgadora da tese de doutorado de Rosa Maria Fernandes Cardoso, título: Estudos estruturais de enzimas antioxidantes relacionadas à doença de Lou Gehring e à esquistossomose, título de Doutor em Ciências (Físico-Química), IQSC/USP, São Carlos, SP, Doutorado, 06/09/02.
9. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou da comissão julgadora da defesa de tese de doutorado de Vitor Marcel Faça, do Centro de Química de Proteínas, da FMRP/USP, realizada na Escola Paulista de Medicina, São Paulo, SP, Doutorado, 13/12/02.
10. Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas, participou da comissão julgadora da defesa de tese de doutorado de Rosa Maria Fernandes Cardoso, título: Estudos estruturais de enzimas antioxidantes relacionadas à doença de Lou Gehring e à esquistossomose, título de Doutor em Ciências (Físico-Química), IQSC/USP, São Carlos, SP, Doutorado, 06/09/2002.
11. Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas, participou da comissão julgadora da defesa de tese de doutorado de Luiz Campos de Campos, título: "Parâmetros de rede do quartzo- β A 1003 K determinados por difração múltipla de nêutrons", Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN, São Paulo, SP, Doutorado.
12. Prof. Dr. Javier Alcides Ellena, participou da comissão julgadora de defesa de tese de doutorado de Ricardo Jorge Cruz Lima, "Estudos estruturais de novos cristais da família dos sulfatos e estudos dos efeitos isotópicos, de temperatura e de pressão em cristais de Taurina", Universidade Federal do Ceará, Centro de ciências Pós-Graduação em Física, Departamento de Física, Fortaleza, CE, Doutorado, 02/08/02.
13. Prof. Dr. Javier Alcides Ellena, participou da comissão julgadora de defesa de tese de doutorado de Edinaldo Teixeira, Espectro vibracional e propriedades dielétricas do Na₂ThF₆, do Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, CE, Doutorado, 10/12/2002.

Exame de Qualificação

1. Prof. Dr. Glaucius Oliva, participou da comissão julgadora para o exame geral de qualificação (DR) de Paulo Henrique Conaggin Godoi intitulado "Estudos cristalográficos sobre proteínas Thil de Arabidopsis thaliana", IQSC/USP, São Carlos, SP, Doutorado, 28/05/02.
2. Prof. Dr. Igor Polikarpov, participou da comissão julgadora para o exame geral de qualificação (DR) de Paulo Henrique Conaggin Godoi intitulado "Estudos cristalográficos sobre proteínas Thil de Arabidopsis thaliana", IQSC/USP, São Carlos, SP, Doutorado, 28/05/02.
3. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou da comissão julgadora para o exame de qualificação de mestrado de Anemari Ramos Dinarte dos Santos, intitulado "Clonagem genômica e expressão do domínio toxina de uma RIP 2 de Abruus pulchellus", Centro de Ciências Biológicas e da Saúde, UFSCar, São Carlos, SP, Mestrado, 11/01/02.
4. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou da comissão julgadora para o exame de qualificação de doutorado de Sandra Cristina Pfister, trabalho intitulado "Análises mutacionais dos sinais envolvidos na localização subcelular da DSCR1", Centro de Ciências Biológicas e da Saúde, UFSCar, São Carlos, SP, Doutorado, 29/01/02.
5. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou da comissão julgadora para o exame de qualificação de doutorado de Alessandra Regina Pepe Ambrozini, intitulado "Produtos naturais da ordem rutales como potenciais compostos de partida para drogas antichagásicas e antileishmanioses", Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia, UFSCar, São Carlos, SP, Doutorado, 15/02/02.
6. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou da comissão do exame de qualificação de mestrado de Viviane Formice Vianna, intitulado, "Padronização da reação de 'trans-splicing in vitro' com extratos nucleares de Trypanosoma cruzi", no Instituto de Química da UNESP, Araraquara, SP, Mestrado, 26/03/02.
7. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou da comissão do exame geral de qualificação de mestrado de Marilena Peixoto Gonçalves Cunha, intitulado "Caracterização da proteína ribossomal TcrL27 em tripanosomatídeos", no Instituto de Química da UNESP, Araraquara, SP, Mestrado, 02/05/02.
8. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou da comissão julgadora do exame geral de qualificação de mestrado de Susana A. Sculaccio, título monografia/trabalho: Clonagem e caracterização da fosforibossilpirofosfato sintetase de cana-de-açúcar, Área de Genética e Evolução, UFSCar, São Carlos, SP, Mestrado, 12/09/02.
9. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou da comissão julgadora para o exame de qualificação de doutorado de Daniella Tambasco Tahari, Candidate genes for growth traits in beef cattle crosses Bos taurus X Bos indicus, do Centro de Ciências Biológicas e da saúde, programa de pós-graduação em genética e evolução, UFSCar, São Carlos, SP, Doutorado, 05/12/02.
10. Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas, participou da comissão julgadora do exame geral de qualificação de Ermerson Luiz Gelamo, "Estudos espectroscópicos das interações da hemoglobina extracelular de Glossoscolex paulistus e albuminas humana e bovina com detergentes iônicos", área de concentração "Química Analítica", IQSC/USP, São Carlos, SP, Doutorado, 03/09/02.
11. Dr. Dulce Helena Ferreira de Souza, participou da comissão julgadora do exame geral de qualificação de doutorado de Roberto Mário Machado Verzola, intitulado "Métodos de análise da expressão gênica", Centro de Ciências Biológicas e da Saúde, UFSCar, São Carlos, SP, Doutorado, 29/04/02.
12. Dr. Dulce Helena Ferreira de Souza, participou da comissão julgadora do exame de qualificação de mestrado de Andressa Patrícia Alves Pinto, intitulada "Structural characterization of a recombinant flagellar calcium binding protein from Trypanosoma cruzi", Centro de Ciências Biológicas e da Saúde, UFSCar, São Carlos, SP, Mestrado, 09/09/02.

Livre-Docência

1. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou da comissão julgadora para obtenção de título de livre-docente junto ao Departamento de Bioquímica, USP, São Paulo, SP, 09-11/12/02.

Adjunto

1. Prof. Dr. Glaucius Oliva, participou da comissão julgadora do concurso para Professor Adjunto para o Setor de Biologia Estrutural do Departamento de Bioquímica Médica da UFRJ para preenchimento de 04 vagas, Rio de Janeiro, RJ, 05-09/05/02.

Titular

1. Prof. Dr. Glaucius Oliva, participou da comissão julgadora do concurso de provimento de dois cargos de Professor Titular, na área de Farmácia Industrial, na Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto/USP, 11 a 13/03/02.

Outros

1. Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano, participou da comissão julgadora do processo seletivo para contratação de um docente na categoria de Professor Doutor para atuar na área de Ressonância Magnética Experimental, junto ao Departamento de Física e Informática, no qual acham-se inscritos os Doutores: Bernd Uwe Foerster, José Fabian Schneider e Eduardo Ribeiro de Azevedo, IFSC/USP, 09/05/02.
2. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou da comissão julgadora do concurso público de provas e títulos p/ provimento de um cargo de Professor Assistente em regime RDIDP, junto ao Departamento de Física e Biofísica, UNESP, Botucatu, SP, 09/08/02.
3. Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas, participou da comissão julgadora do Concurso Público para preenchimento de um cargo, professor assistente, regime efetivo junto ao Departamento de Físico-Química, UNESP, Prof. Carlos de Oliveira Paiva Santos, Araraquara, SP, 20-21/06/02.

Assessoria no Julgamento e Avaliação de Projetos

-  **Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano**
Assessoria CNPq - 02 pareceres
Assessoria FAPESP - 05 pareceres
-  **Prof. Dr. Glaucius Oliva**
Assessoria FAPESP - 52 pareceres
Assessoria CNPq - 03 pareceres
-  **Prof. Dr. Igor Polikarpov**
Assessoria FAPESP - 14 pareceres
Assessoria CNPq - 02 pareceres
-  **Prof. Dr. Richard Charles Garratt**
Assessoria FAPESP - 20 pareceres
Assessoria CNPq - 01 parecer
-  **Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas**
Assessoria FAPESP - 06 pareceres
Assessoria CNPq - 03 pareceres
Assessoria Universidade Maringá - 02 pareceres
Assessoria IFSC - 01 parecer
-  **Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann**

Consultoria

1. Eurofarma Laboratórios Ltda. - Contrato de Assessoria Técnico-Científica na Gestão de Projetos de Pesquisa e Desenvolvimento de Novos Fármacos, por intermédio do Laboratório de Cristalografia de Proteínas e Biologia Estrutural, vigência 02/04/2001 a 01/04/2004, **Prof. Dr. Glaucius Oliva** e **Prof. Richard Charles Garratt**.

Serviços à Comunidade

 **Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann** - Laboratório de Bioquímica

1. Teste inibição enzimática (GAPDH e APRT) - Universidade Federal de São Carlos-UFSCar, São Carlos, SP (Profs. Drs. Paulo C. Vieira; Maria de Fátima G. F. da Silva; Arlene G. Correa), total de análises: 1.347 amostras
2. Teste inibição enzimática (GAPDH e APRT)-Dr. Marcos Sá, Universidade Federal de Santa Catarina, SC, (Prof. Dr. Marcus Sá), total de análises: 58 amostras;
3. Teste inibição enzimática (GAPDH e APRT)-EUA (Dr. Gary Meints), total de análises: 98 amostras;
4. Teste inibição enzimática (GAPDH e APRT)- IQSC/USP/São Carlos (Prof. Dr. Roberto Berlinck), total de análises: 402 amostras;
5. Teste inibição enzimática (GAPDH e APRT)-USP/Ribeirão Preto, SP (Profa. Dra. Monica Pupo), total de análises: 161 amostras.
6. Sequenciamento de DNA para a Profa.Dra. Heloisa Sobreiro selistre de Araújo – UFSCar, São Carlos, SP: 49 reações de PCR e 49 amostras sequenciadas e analisadas.
7. Confeção de gel de eletroforese para o Prof. Dr. Luiz Alberto Colnago – Embrapa, São Carlos, SP: 20 amostras.

 **Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas** - Laboratório de Raios-X Cristalografia

USP - IFSC	541	
USP - IQSC	251	
USP - EESC		008
USP - Pirassununga	018	
USP - IPEN	019	
EMBRAPA - SC	039	
UFSCar	298	
Unicamp	033	
UNESP - Araraquara	006	
UNESP - Ilha Solteira	040	
UEPG	069	
UEPR	015	
UFAL	004	
Total Geral		1.341

Serviço Prestado	Instituição	Prof. Dr. Responsável	Pessoal Envolvido	Total de Análises
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Cristalografia IFSC	Yvonne Primerano Mascarenhas	004	055
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Crescimento de Cristais IFSC	Valmor R. Mastelaro	003	174
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Crescimento de Cristais IFSC	José Pedro Andreetta	001	022
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Crescimento de Cristais IFSC	Antônio Carlos Hernandez	007	210
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Ótica IFSC	Máximo Siu Li	001	017
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Ótica IFSC	Milton Ferreira de Souza	003	031
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Ressonância Magnética - IFSC	José Pedro Donoso Gonzales	001	001
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Ressonância Magnética - IFSC	Tito Bonagamba	001	012
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Ressonância Magnética - IFSC	José Shinneider	001	002
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Polímeros IFSC	Oswaldo Novaes de O. Jr.	003	016
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Orgânica IQSC	Elizabete Frollini	001	001
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Orgânica IQSC	Antônio Aprígio da Silva Curvelo	004	072
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Físico Química IQSC	Agnieszka Joanna Pawlicka Maule	001	011
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Eletroquímica IQSC	Ernesto Rafael Gonzalez	004	065
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Eletroquímica IQSC	Edson Antônio Ticianelli	003	028
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Eletroquímica IQSC	Francisco C. Nart.	001	002
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Orgânica Analítica IQSC	Benedito Garcia Ferreira	001	006
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Física Molecular IQSC	Edson Rodrigues	001	001
Análises por Difração de Raios X	Grupo M.E.M.E IQSC	Luiz Alberto Avaca	001	007
Análises por difração de Raios X	Grupo de Cristalografia do IQSC	Regina Santos	001	010
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Físico -Química Org. IQSC	Sérgio Paulo Campana Filho	003	043
Análises por Difração de Raios X	NET e IQSC	Wagner Luiz Polito	001	005
Análises por Difração de Raios X	EESC - SMF	Samuel Irati Novaes Gomes	001	001
Análises por Difração de Raios X	EESC - FIPAI	Maria Isabel Caries	001	007
Análises por Difração de Raios X	UEPr - Maringá	Nelci Helena Maia Gutierrez	001	015
Análise por Difração de Raios X	Dep. de Física - UFAL	Carlos Alberto de Simone	001	004
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Polímeros Embrapa	Luiz H. C. Mattoso	001	039
Análises por Difracção de Raios X	Dema - UFSCar	Anselmo Ortega Boschi	001	056
Análises por Difração de Raios X	Dema - UFSCar	José de Anchieta Rodrigues	001	002
Análises por Difração de Raios X	Dep. Física Grupo Cer. Ferroelétrica UFSCar	Ducinei Garcia	004	070
Análises por Difração de Raios X	Dep. Física Grupo Cer. Ferroelétrica UFSCar	José Antônio Eiras	005	125
Análises por Difração de Raios X	UEPr - Maringá	Nelci Helena Maia Gutierrez	001	015
Análise por Difração de Raios X	Dep. de Física - UFAL	Carlos Alberto de Simone	001	004
Análises por Difração de Raios X	DEQ - UFSCar	Ernesto Urqueta Gonzalez	001	005
Análises por Difração de Raios X	DEMa - UFSCar	Victor Carlos Pandolfelli	001	009
Análises por Difração de Raios X	DEMa - UFSCar	Dilson Cardoso	001	004
Análises por Difração de Raios X	DEQ UFSCar	José Maria C. Bueno	001	001
Análises por Difração de Raios X	DEMa - UFSCar	Rosaria Euda Suman Bretas	001	026
Análises por Difração de Raios X	Instituto de Química - UNESP de Araraquara	Antônio Carlos Guastaldi	001	006
Análises por Difração de Raios X	UEPr - Maringá	Nelci Helena Maia Gutierrez	001	015

Análise por Difração de Raios X	Dep. de Física - UFAL	Carlos Alberto de Simone	001	004
Análises por Difração de Raios X	Dep. de Ótica - UEPG	Gerson K. R. da Cruz	001	006
Análises por Difração de Raios X	Dep. de Física - UEPG	André M. Brinatti	004	063
Análises por Difração de Raios X	Dep. de Vidros e Cer. UNESP – I.Solt.	Claudio Carvalho	001	006
Análises por Difração de Raios X	Grupo de Polímero UNESP – Ilha Solteira	José A. Malmonge	001	011
Análises por Difração de Raios X	Dep. Vidros e Cerâmicas. UNESP – Ilha Solteira	Eudes Borges	001	029
Análises por Difração de Raios X	FZAE – USP de Pirassununga	Paulo José do Amaral Sobral	001	018
Análises por Difração de Raios X	IPEN – USP	Denise M. Fazzell	001	019
Análises por Difração de Raios X	Grupo Geoquímica de Superfície – Unicamp	Silvania Maria Netto	001	009
Análises por Difração de Raios X	Grupo Filme Unicamp	Fernando Alvarez	002	024

Entrevistas Concedidas

Televisão

1. Programa gavado: Título "Vida e Ciência" no. 9 (inédito), Matérias: Manutenção de máquinas agrícolas, Fisioterapia UFSCar, Luta contra Chagas, duração 1 hora, Prof. Dr. Glaucius Oliva.
2. Entrevista EPTV, com Dr. G. Malnic, IEA, Profa. Dra. Yvonne Primerano, 0/04/02.

Responsabilidade de Docentes do FFI no Setor de Infra-Estrutura do IFSC

1. Prof. Dr. Glaucius Oliva, Coordenador do Grupo de Cristalografia.
2. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, Vidraria, 05/10/97 até presente data.

Representação e Participação em Comissões no IFSC

Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano

1. Membro nato dos órgãos colegiados do FFI/IFSC: Conselho de Departamento, Congregação.

Prof. Dr. Glaucius Oliva

1. Membro Titular dos Colegiados do FFI/IFSC: Conselho de Departamento, Congregação e CTA.
2. Presidente do Conselho de Departamento, 2000-2004.
3. Suplente do Presidente da CPG, 11/08/2000 – 10/08/2002.
4. Comissão Interna de Sindicância para averiguação de desaparecimento de bens do IFSC.
5. Suplente do Representante do Conselho Universitário, CO – 01/08/02 a 26/03/03.

Prof. Dr. Richard Charles Garratt

1. Suplente dos Professores Associados junto ao Conselho Departamental-25/09/2000-24/09/2002.
2. Suplente dos Professores Associados junto a Congregação - 02/10/2000-01/10/2002.
3. Membro titular da Comissão de Pós-Graduação do IFSC/USP INDICADO EM 06/08/2001 of.Dir.143/2001/IFSC/07.08.01, período 17/10/2001 até 16/10/2004.
4. Coordenador da Área Setorial da Física, CPG, 03/07/2001 até 17/02/2004.

Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann

1. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, Membro suplente do Prof. Richard Charles Garratt junto a Comissão de Pós-Graduação do IFSC/USP indicado em 06/08/2001 of.Dir.143/2001/IFSC/07/08/01 até 16/10/04.
2. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, indicado membro suplente da CPG - programa de Pós-Graduação Interunidades em Bioinformática da USP, a partir de 15/07/2002.
3. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, ofício PPGGEV no. 353/02 - 04/10/2002 - Comissão p/ Exame de seleção ao Mestrado em Genética e Evolução – 2003.

Representação e Participação em Comissões Externas ao IFSC

1. Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano, Membro do Conselho Curador da Fundação de Apoio à Física e à Química-FAFQ, indicado pela congregação do IFSC- mandato de 27/05/2002 a 27/05/2006.
2. Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano, Co-Editor da Acta Crystallographica A e B 1997 até a presente data.
3. Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano, Editor do Brazilian Journal of Physics, Brasil, 1997 até a presente data.
4. Prof. Dr. Glaucius Oliva, Diretor do CBME-CEPID/FAPESP, 01/10/00-01/10/05.
5. Prof. Dr. Glaucius Oliva, Editor da Acta Crystallographica D, 1997 até a presente data.
6. Prof. Dr. Glaucius Oliva, membro do corpo editorial da revista Biological Crystallography, 1997 até a presente data.
7. Prof. Dr. Glaucius Oliva, membro do corpo editorial da Journal of Synchrotron Radiation, 1997 até a presente data.
8. Prof. Dr. Igor Polikarpov, responsável pelo laboratório de raios X do Grupo de Cristalografia do FFI/IFSC/USP, 2002 até presente data.
9. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, Diretor, Coordenador de Inovação do CBME-CEPID/FAPESP, 01/10/2000 a 01/10/05.
10. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, Comissão Interna de Biossegurança (CIBio): Universidade de São Paulo, Campus de São Carlos. Comissão Técnica Nacional de Biossegurança (CTNBio) do Ministério da Ciência e Tecnologia - MCT, Secretaria Executiva.
11. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, responsável pelo laboratório de bioquímica do Grupo de Cristalografia do FFI/IFSC/USP, 2002 até presente data.
12. Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas, Ouvidora da Prefeitura do Campus Administrativo de São Carlos, 2001-2003.
13. Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas, Representante da USP junto ao Conselho de Curadores da Fundação Parque de Alta Tecnologia São Carlos - ParqTec, 04/08/98, Proc. USP 8.1.502.1, até 2003.
14. Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas, Presidente da Sociedade Brasileira de Cristalografia-SBCr, 13/06/02 a 12/06/04.
15. Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas, indicada para integrar o Conselho Consultivo do Projeto Universidade Aberta à Terceira Idade, Of. PRCEU-30/2002 de 06 de maio de 2002. 25/04/02.
16. Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas, pertence ao quadro de consultores ad hoc da Universidade Estadual de Maringá, registro no. 333-PES, livro no. 001/2002, 28/06/02.
17. Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas, indicada como membro titular para representar a Universidade de São Paulo, SP, junto ao Conselho de Curadores da Fundação Parque de Alta Tecnologia São Carlos, 24/07/02.

Encargos Administrativos

1. Prof. Dr. Glaucius Oliva, Chefe do Departamento do FFI, 27/03/2000 a 26/03/2004.
2. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, Diretor-Presidente da FAFQ, 01/04/2001 até 01/04/2003.
3. Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas, Vice-Coordenadora do Instituto de Estudos Avançados do Campus de São Carlos - ofício IEA-DIR-052/98, 28/08/98 até presente data.

Promoção e Organização de Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais

Palestra

Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano

1. Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano, proferir palestra intitulada "Determinação de estruturas moleculares por difração de raios-X: Engenharia molecular aplicada a problemas relacionados à contaminação por metais pesados", no IFUSP, São Paulo, 12/09/02.

Prof. Dr. Glaucius Oliva

1. Prof. Dr. Glaucius Oliva, proferiu palestra intitulada "Relação estrutura função das proteínas", ICB, USP, São Paulo, SP, 01/03/02.

- Prof. Dr. Glaucius Oliva, proferiu palestra intitulada "Rational sedign and biodiversity in the search of new anti-chagas drugs" no Simpósio Drugs Against Tropical Protozoan Parasites: Target Selection, Structural Biology and Rational Medicinal Chemistry, Keystone, Colorado, EUA, 03-08/03/02.
- Prof. Dr. Glaucius Oliva, proferiu palestra intitulada: "De genes a fármacos: aplicação a doenças parasitárias", Instituto de Biologia Molecular do Paraná da Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR, 23/05/02.
- Prof. Dr. Glaucius Oliva, proferiu colóquio intitulado "A dupla face", IFSC/USP, São Carlos, SP, 28/06/02.
- Prof. Dr. Glaucius Oliva, proferiu conferência intitulada De genes a fármacos: aplicação a doenças parasitárias no 48º. Congresso Nacional de Genética organizado pela Sociedade Brasileira de Genética (SBG) , Hotel Monte Real Resort, Águas de Lindóia, SP, 19/09/02.
- Prof. Dr. Glaucius Oliva, proferiu palestra intitulada: "Synchrotron radiation in drug design for parasitic diseases Inter-American Workshop on the use of Synchrotron Radiation: Applications to Macromolecules and Biological Systems, LNLS/Campinas, SP, 09-11/12/03.
- Prof. Dr. Glaucius Oliva, proferiu palestra intitulada "Target-directed drug discovery in tropical diseases", no ICS-UNIDO Workshop on Trends and Applications of Combinatorial Chemistry and Combinatorial Technologies, São Pedro, SP, 23/11/02.
- Prof. Dr. Glaucius Oliva, ministrará palestra "Estrutura proteínas e o planejamento racional de fármacos", no curso: "Teoria e prática da biologia molecular e da biotecnologia: implicações éticas, sociais e econômicas", IFSC, USP, São Carlos, SP, 25/11/02.
- Prof. Dr. Glaucius Oliva, proferiu palestra intitulada Synchrotron radiation in drug design for parasitic diseases", no no IAWS-PROGRAM - Inter-American Workshop on the use of Synchrotron Radiation: Applications to Macromolecules and Biological Systems no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS, Campinas, SP, 09/12/02.

Prof. Dr. Igor Polikarpov

- Prof. Dr. Igor Polikarpov, proferir palestra intitulada "Macromolecular crystallography data collection for high throughput projects" no Inter-American Workshop on the use of Synchrotron Radiation: Applications to Macromolecules and Biological Systems - IAWS-, Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS, Campinas, SP, 10-11/12/02.
- Prof. Dr. Igor Polikarpov, proferir palestra intitulada "Protein Crystallography in Post-Genomics ERA colaboração Científica com pesquisadores do Instituto Ludwig, São Paulo – SP, 19/07/02.
- Prof. Dr. Igor Polikarpov, ministrará palestra "Será que a cristalografia de proteínas pode ajudar determinar a sequência de aminoácidos de proteínas?", Universidade Estadual Norte Fluminense, Campos, RJ, 24-26/06/2002.

Prof. Dr. Richard Charles Garratt

- Prof. Dr. Richard Charles Garratt, proferir palestra intitulada "Structural biology & tropical parasites", no XXXI National Congress & Biophysics, Argentina, Buenos Aires, 04-06/12/02.

Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann

- Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, proferir palestra intitulada "the purine salvage pathway as a target for drug design" na XXXI Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular (SBBq), Caxambú, MG, 18 a 22/05/2002.
- Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, proferir palestra intitulada "Sequenciamento e organização do genoma / Os projeto genoma", no curso: "Teoria e prática da biologia molecular e da biotecnologia: implicações éticas, sociais e econômicas", IFSC, USP, São Carlos, SP, 07/10/02.
- Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, proferir palestra intitulada "Rational Sedign and Biodiversity in the Search of New Anti-Chagas Drugs", no Simpósio Drugs Against Tropical Protozoan Parasites: Target Selection, Structural Biology and Rational Medicinal Chemistry, Keystone, Colorado, EUA, 02-09/03/02.

Prof. Dr. Richard Charles Garratt

- Prof. Dr. Richard Charles Garratt, proferir palestra intitulada "Structural biology & tropical parasites", no XXXI National Congress & Biophysics, Argentina, Buenos Aires, 04-06/12/02.
- Prof. Dr. Richard Charles Garratt, proferir palestra "Construção de Modelos de Proteínas por Homologia" na Escola de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos, no Laboratório Nacional de Computação Científica-LNCC, Petrópolis, RJ, 12/08/02.

Seminário

Prof. Dr. Glaucius Oliva

- Prof. Dr. Glaucius Oliva, proferir seminário no Simpósio Drugs Against Tropical Protozoan Parasites: Target Selection, Structural Biology and Rational Medical Chemistry, Afastamento para Keystone, Colorado, EUA, 02-09/03/02.
- Prof. Dr. Glaucius Oliva, proferir seminário "Cristalografia de proteínas: sua aplicação na elucidação do genoma humano funcional" no Centro de Estudos do Genoma Humano (CEGH), USP, São Paulo, USP, 23/08/02.

Prof. Dr. Igor Polikarpov

- Prof. Dr. Igor Polikarpov, proferir seminário, no Satellite Meeting of the XIV International Biophysics Congress, no Hotel Maríná, promovido pela Universidade Federal do Rio de Janeiro – RJ, 23-26/04/02.

Prof. Dr. Richard Charles Garratt

- Prof. Dr. Richard Charles Garratt, proferir seminário intitulado "Relação Estrutura-Função das Proteínas", no Centro de Tratamento e Pesquisa Hospital do Câncer A C. Camargo, São Paulo, SP, 01/03/02.
- Prof. Dr. Richard Charles Garratt, proferir seminário intitulado "Aplicações da modelagem de proteínas por homologia: Três colaborações frutíferas entre a FIOCRUZ e o Instituto de Física de São Carlos ao longo dos últimos dez anos", FIOCRUZ, Rio de Janeiro, RJ, 19/04/02.
- Prof. Dr. Richard Charles Garratt, proferir seminário intitulado "Applied homology Modelling" no Workshop in Molecular Modeling in Biophysics, methods and applications. Satellite meeting of the 2002 IUPAB International Biophysics Congress, Rio de Janeiro, RJ, 04/05/02.

Dra. Dulce Helena Ferreira de Souza

- Dra. Dulce Helena Ferreira de Souza, proferiu seminário intitulado "Purificação e Caracterização de Macromoléculas", para o Programa Especial de Treinamento(PET), Química, UFSCar/MEC 29/05/02.

Cursos

Prof. Dr. Glaucius Oliva

- Prof. Dr. Glaucius Oliva, Curso "Introdução a estrutura de proteínas e sua importância na descoberta de novos fármacos" no Curso "Biologia Estrutural e Modelagem de Fármacos", organizado pelo Grupo de Cristalografia, IFSC/USP, de 01 a 12/07/02 que teve a iniciativa do Ministério da Ciências e Tecnologia (MCT) e Centro Brasileiro-Argentino de Biotecnologia (CBAB), 01/07/02.
- Prof. Dr. Glaucius Oliva, Curso "Introdução à difração por raios-X & determinação de estruturas por MIR"; Curso "Biologia Estrutural e Modelagem de Fármacos", organizado pelo Grupo de Cristalografia, IFSC/USP, de 01 a 12/07/02 que teve a iniciativa do Ministério da Ciências e Tecnologia (MCT) e Centro Brasileiro-Argentino de Biotecnologia (CBAB), 03/07/02.
- Prof. Dr. Glaucius Oliva, Curso "Planejamento de drogas em doenças parasitárias" no Curso "Biologia Estrutural e Modelagem de Fármacos", organizado pelo Grupo de Cristalografia, IFSC/USP, de 01 a 12/07/02 que teve a iniciativa do Ministério da Ciências e Tecnologia (MCT) e Centro Brasileiro-Argentino de Biotecnologia (CBAB), 04/07/02.
- Prof. Dr. Glaucius Oliva, Curso "Refinamento" no Curso "Biologia Estrutural e Modelagem de Fármacos", organizado pelo Grupo de Cristalografia, IFSC/USP, de 01 a 12/07/02 que teve a iniciativa do Ministério da Ciências e Tecnologia (MCT) e Centro Brasileiro-Argentino de Biotecnologia (CBAB), 09/07/02.
- Prof. Dr. Glaucius Oliva, ministrará aula intitulada "Relação estrutura função das proteínas" no ICB/USP, São Paulo, SP, 01/03/02.
- Prof. Dr. Glaucius Oliva, ministrará curso intitulado "Curso de Especialização em Bioinformática" no Laboratório Nacional de Computação Científica, LNCC, Petrópolis, RJ, 01 a 04/05/2002.
- Prof. Dr. Glaucius Oliva, ministrará curso intitulado "Curso de Especialização em Bioinformática" no Laboratório Nacional de Computação Científica, LNCC, Petrópolis, RJ, 26 a 27/09/2002.

Prof. Dr. Igor Polikarpov

- Prof. Igor Polikarpov, Curso de "Coleta e Processamento de Dados" no Curso Biologia Estrutural e Modelagem de Fármacos, no FFI/IFSC/USP, São Carlos, SP, 05/07/02.
- Prof. Igor Polikarpov, Curso de "Radiação Síncrotron em Biologia Estrutural" no Curso Biologia Estrutural e Modelagem de Fármacos, no FFI/IFSC/USP, São Carlos, SP, 05/07/02.

Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann

- Prof. Otavio Henrique Thiemann, Curso de "Seleção, Validação e expressão de genes alvo" no Curso "Biologia Estrutural e Modelagem de Fármacos FFI/IFSC/USP, São Carlos, SP, 01/07/02.
- Prof. Otavio Henrique Thiemann, Curso de "Via de Biosíntese de Purinas como alvo em planejamento de drogas", no Curso Biologia Estrutural e Modelagem de Fármacos, FFI/IFSC/USP, São Carlos, SP, 03/07/02.

 Prof. Dr. Richard Charles Garratt

1. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, ministrar curso de Bioinformática - Estrutura das Proteínas, no Laboratório Nacional de Computação e Ciências-LNCC, Petrópolis, RJ, 28-30/04/02.
2. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, ministrar curso de Bioinformática - Modelagem da estrutura das proteínas por homologia, no Laboratório Nacional de Computação e Ciências- LNCC, Petrópolis, RJ, 05-08/05/02.
3. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou da Avaliação do curso de Bioinformática no Laboratório Nacional de Computação e Ciências-LNCC, Petrópolis, RJ, 10/06/02.
4. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, organizou o "Curso: Biologia Estrutural e Modelagem de Fármacos", no âmbito das atividades do CNPq/CBAB- Conselho Binacional do Centro Brasileiro-Argentino de Biotecnologia, 30 participantes, FFI/IFSC/USP, São Carlos, SP, 01-12/03/02.
5. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, curso de "Introdução a Estrutura de Proteínas e sua importância na Descoberta de Novos Fármacos" no Curso: Biologia Estrutural e Modelagem de Fármacos, no FFI/IFSC/USP, São Carlos, SP, 01/07/02.
6. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, Curso de "Modelagem por Homologia", no Curso de Biologia Estrutural e Modelagem de Fármacos, no FFI/IFSC/USP, São Carlos, SP, 11/07/02.
7. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, curso de "Avaliação da Qualidade de Estruturas" no Curso: Biologia Estrutural e Modelagem de Fármacos, no FFI/IFSC/USP, São Carlos, SP, 09/07/02.
8. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, aula sobre Modelagem Molecular de Proteínas, no Curso Vacinas: Fiocruz, Rio de Janeiro, RJ, 28/08/02.
9. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, ministrar cursos de Bioinformática no Laboratório Nacional de Computação e Ciências- LNCC, Petrópolis, RJ, 23-25/09/02.
10. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, ministrar curso de Bioinformática para os professores da UNESP, oferecido pelo Laboratório de Bioinformática do Laboratório Nacional de Computação e Ciências-LNCC, Unesp, São Paulo, SP, 27/09/02.
11. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, ministrar cursos de Bioinformática no Laboratório Nacional de Computação e Ciências- LNCC, Petrópolis, RJ, 06-09/10/02.
12. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, aula sobre "Montando uma proteína", no curso: "Teoria e prática da biologia molecular e da biotecnologia: implicações éticas, sociais e econômicas", IFSC, USP, São Carlos, SP, 18/11/02.

Outros **Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano**

1. Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano, membro do conselho curador da Fundação de Apoio à Física e à Química indicado pela congregação do IFSC/USP, mandato de 27/05/2002 A 27/05/06.
2. Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano, participou da Pré-comissão para elaborar o Regimento da Comissão de Pesquisa do IFSC (CPq), IFSC/USP, trecho de ata 67º de 29/10/02.
3. Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano, participou de reunião na FAPESP com Diretor Científico sobre projeto temático, São Paulo, SP, 13/11/02
4. Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano, dar continuidade ao desenvolvimento de pesquisas vinculadas ao projeto temático FAPESP Processo 98/12151-1, intitulado "Studies of the molecular and electronic structures of small molecules for pharmacological and environmental applications", na Universidad Nacional de La Plata, Departamento de Física, La Plata, Argentina, 25/10-01/11/02.

 Prof. Dr. Glaucius Oliva

1. Prof. Dr. Glaucius Oliva, participou de reunião na Reitoria da USP, São Paulo, SP, 14/02/02.
2. Prof. Dr. Glaucius Oliva, participou de reunião na Empresa Eurofarma Laboratórios Ltda., relativa à execução do projeto de pesquisa intitulado "Desenvolvimento de Drogas Anti-inflamatórias pela Inibição Específica da Enzima Prostaglandina Endoperoxídeo Sintase-2 (PGHS-2 ou COX-2)", São Paulo, SP, 14/02/02.
3. Prof. Dr. Glaucius Oliva, participou de reunião de trabalho na empresa Eurofarma Laboratórios Ltda. Relativa à execução do projeto de pesquisa intitulado "Desenvolvimento de drogas anti-inflamatórias pela inibição específica da enzima prostaglandina endoperoxídeo sintase-2 (PGHS-2 ou COX-2)", São Paulo, SP, 01/03/02.
4. Prof. Dr. Glaucius Oliva, visita de integração à Profa. Vanderlan Bolzani no Laboratório de Produtos Naturais do Instituto de Química da UNESP campus de Araraquara, Araraquara, SP, 04/04/2002.
5. Prof. Dr. Glaucius Oliva, participou de reunião junto ao Diretor do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, Prof. José Antonio Brum, Campinas, SP, 08/04/2002.
6. Prof. Dr. Glaucius Oliva, visita ao grupo de pesquisa do Prof. Gilberto Schwartzman para reunião de interação sobre projeto de desenvolvimento de novos medicamentos na Faculdade de Medicina da Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Porto Alegre, RS, 29/04/02.
7. Prof. Dr. Glaucius Oliva, visita ao grupo de pesquisa do Prof. Rosendo Yunes para reunião de interação sobre projeto de desenvolvimento de novos medicamentos (produtos naturais) contra Hiperplasia Benigna de Próstata no Departamento de Química da Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, manhã do 30/04/02.
8. Prof. Dr. Glaucius Oliva, visita ao grupo de pesquisa do Prof. Valdir Cechinel para reunião de interação sobre projeto de desenvolvimento de novos anestésicos com base em produtos naturais na Universidade do Vale do Itajaí, Itajaí, SC, tarde do dia 30/04/02.
9. Prof. Dr. Glaucius Oliva, visita organizada pelo FINEP, para avaliar um projeto PADCT coordenado pelo Prof. Marco Antonio Criguer intitulado "Obtenção em escala industrial (150.000 testes/ano) de kits diagnóstico para Doença de Chagas utilizando antígenos recombinantes", Apresentar seminário a convite do Prof. Samuel Goldenberg. As atividades serão desenvolvidas no Instituto de Biologia Molecular do Paraná da Universidade Federal do Paraná Curitiba, PR, 23/05/02.
10. Prof. Dr. Glaucius Oliva, participou, na FAPESP, de reunião junto aos assessores internos da Diretoria Científica e os pesquisadores do Estado que mais se têm valido de apoio da FAPESP para Desenvolvimento de projetos de pesquisa – especialmente os coordenadores de projetos de grande porte, como Projetos Temáticos, CEPIDs e Programas Especiais, São Paulo, SP, 29/05/02.
11. Prof. Dr. Glaucius Oliva, visita de intercâmbio em pesquisa com a Profa. Vanderlan Bolzani no Laboratório de Produtos Naturais do Instituto de Química da UNESP campus de Araraquara, SP, 18/07/02.
12. Prof. Dr. Glaucius Oliva, visita técnica à empresa farmacêutica Cristália, Itapira, SP, 19/07/02.
13. Prof. Dr. Glaucius Oliva, participou da reunião do Conselho Universitário USP São Paulo, SP, 20/08/02.
14. Prof. Dr. Glaucius Oliva, representar o IFSC no Stand montado na II Feira das Profissões da USP, Piracicaba, SP, 26/08/02.
15. Prof. Dr. Glaucius Oliva, visita de interação de pesquisa ao laboratório do Prof. Carlos Frederico M. Menck do Departamento de Microbiologia do Instituto de Ciências Biomédicas, USP, São Paulo, SP, 07/10/02.
16. Prof. Dr. Glaucius Oliva, reunião sobre expansão do campus novo USP/São Carlos: criação da área de Inovação Tecnológica, ICMC/USP, São Carlos, SP, 11/10/02.
17. Prof. Dr. Glaucius Oliva, participou de reunião de trabalho na empresa Eurofarma Laboratórios Ltda. Relativa à execução do projeto de pesquisa intitulado "Desenvolvimento de Drogas Anti-inflamatórias pela Inibição Específica da Enzima Prostaglandina Endoperoxídeo Sintase-2 (PGHS-2 ou COX-2)", São Paulo, SP, 17/10/02.
18. Prof. Dr. Glaucius Oliva Participou de reunião do Centro de Biotecnologia Molecular Estrutural – CBME/CEPID, no LNLS, Campinas, SP, 14/11/02.
19. Prof. Dr. Glaucius Oliva, reunião sobre "Biota", UFSCar, São Carlos, SP, 25 a 26/11/02.
20. Prof. Dr. Glaucius Oliva, participou de reunião de trabalho na empresa Eurofarma Laboratórios Ltda. relativa à execução do projeto de pesquisa intitulado "Desenvolvimento de Drogas Anti-inflamatórias pela Inibição Específica da Enzima Prostaglandina Endoperoxídeo Sintase-2 (PGHS-2 ou COX-2)", São Paulo, SP, 05/12/02.
21. Prof. Dr. Glaucius Oliva, reunião com o Dr. Luis Mir junto ao conselho editorial do livro "Genômica", São Paulo, SP, 06/12/02.
22. Prof. Dr. Glaucius Oliva, visita ao Laboratório de Produtos Naturais do Instituto de Química da UNESP (campus de Araraquara), Profa. Vanderlan Bolzani, para discussão de projeto de pesquisa em colaboração, Araraquara, SP, 12/12/02.
23. Prof. Dr. Glaucius Oliva, reunião com os professores do 1º ano do Curso de Engenharia Ambiental para apresentação do geral do curso e definição da bibliografia básica necessária para as disciplinas do 1º ano (Disciplina FCM0402 Física), EESC/USP, São Carlos, SP, 16/12/02.

 Prof. Dr. Igor Polikarpov

1. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS),

Campinas, SP, 14/05/2002.

2. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), Campinas, SP, 08/05/2002
3. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), Campinas, SP, 02/05/2002.
4. Prof. Dr. Igor Polikarpov, colaboração científica com o Departamento de Bioquímica, Instituto Butantã /USP, São Paulo, SP, 17/04/02.
5. Prof. Dr. Igor Polikarpov, colaboração científica com o Departamento de Bioquímica, Instituto Butantã /USP, São Paulo, SP, 17/04/02.
6. Prof. Dr. Igor Polikarpov, participou de Reunião UnB com Prof. Ralf Rigeiro, Brasília-DF, 28-31/03/2002.
7. Prof. Dr. Igor Polikarpov, colaboração científica com Depto. de Química e Genética, UNICAMP, Campinas, SP, 10/04/02.
8. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), Campinas, SP, 08/04/02.
9. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS, Campinas, SP, 27/03/02.
10. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), Campinas, SP, 08/03/02.
11. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS, Campinas, SP, 04-05/02/02.
12. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS, Campinas, SP, 07/01/02.
13. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS, Campinas, SP, 14/01/02.
14. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS, Campinas, SP, 31/01/02.
15. Prof. Dr. Igor Polikarpov, participou de Reunião UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 19-21/02/2002.
16. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS, Campinas, SP, 18/06/2002.
17. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS, Campinas, SP, 17/07/2002.
18. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron LNLS, Campinas, SP, 30/07/2002.
19. Prof. Dr. Igor Polikarpov, colaboração científica sobre receptores nucleares com o Grupo de Farmacologia da UnB, Brasília-DF, 20-22/09/2002.
20. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS, Campinas, SP, 27/09/02
21. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS, Campinas, SP, 01/10/02.
22. Prof. Dr. Igor Polikarpov, colaboração científica com o Departamento de Bioquímica, USP, São Paulo, SP, 08/10/02.
23. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS, Campinas, SP, 07/11/02.
24. Prof. Dr. Igor Polikarpov, participou de reunião do Centro de Biotecnologia Molecular Estrutural – CBME/CEPID, no LNLS, Campinas, SP, 14/11/02.
25. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS, Campinas, SP, 21/11/02
26. Prof. Dr. Igor Polikarpov, colaboração científica com o Departamento de Química, UNICAMP, no âmbito do projeto temático FAPESP, 28/11/02.
27. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS, Campinas, SP, 03/12/02.
28. Prof. Dr. Igor Polikarpov, desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS, Campinas, SP, 21/12/02.

Prof. Dr. Javier Alcides Ellena

1. Prof. Dr. Javier Alcides Ellena, visita técnica na empresa Buckner Nonius, Delft, Holanda, 17-22/08/02.
2. Prof. Dr. Javier Alcides Ellena, reunião na FAPESP com Diretor Científico sobre projeto temático, São Paulo, SP, 13/11/02

Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann

1. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou de reunião no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS, para decisão final dos nomes dos palestrantes para a XIII Reunião Anual de Usuários do LNLS, Campinas, SP, 24/09/02.
2. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou de reunião do Centro de Biotecnologia Molecular Estrutural, CBME/CEPID, no LNLS, Campinas, SP, 14/11/02.
3. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, aula sobre Histórico (Biologia Molecular / Biotecnologia) Distribuição de 1 artigo para ser discutido no próximo encontro (O impacto da Biologia Molecular), no curso: "Teoria e prática da biologia molecular e da biotecnologia: implicações éticas, sociais e econômicas", IFSC, USP, São Carlos, SP, 02/09/02.
4. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, membro da SBBq, admissão como membro ordinário na reunião do colegiado diretor da Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular, sócio no. 2529, 21/05/2002 - OFSbbq.071/02.
5. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, indicado membro suplente do programa de Pós-Graduação Interunidades em Bioinformática da USP, a partir de 15/07/2002.
6. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou da Comissão para Exame de seleção ao Mestrado em Genética e Evolução – 2003, ofício PPGGEv no. 353/02, 04/10/2002.

Richard Charles Garratt

1. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, visita a firma Biogen Inc., Cambridge, MA, USA, 08-12/03/02.
2. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou da reunião de trabalho na empresa Eurofarma Laboratórios Ltda. Relativa à execução do projeto de pesquisa intitulado "Desenvolvimento de Drogas Anti-inflamatórias pela Inibição Específica da Enzima Prostaglandina Endoperoxídeo Sintase-2 (PGHS-2 ou COX-2)", São Paulo, SP, 14/02/02.
3. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou de Reunião sobre patentes na UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 19/02/02.
4. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou da reunião de trabalho na empresa Eurofarma Laboratórios Ltda. Relativa à execução do projeto de pesquisa intitulado "Desenvolvimento de Drogas Anti-inflamatórias pela Inibição Específica da Enzima Prostaglandina Endoperoxídeo Sintase-2 (PGHS-2 ou COX-2)", São Paulo, SP, 01/03/02.
5. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, visita para Avaliação de Projetos FINEP Verde-amarelo na UNESP, Araraquara, SP, 04/04/02.

6. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, visita para Avaliação de Projetos Verde-amarelo no Laboratório do Prof. Dr. José Pedrazzoli Jr., coordenador dos projetos de estudos farmacológicos e toxicológicos de novos fármacos da Universidade de São Francisco, Bragança Paulista, SP, 05/04/02.
7. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, visita de integração à Profa. Vanderlan Bolzani no Laboratório de Produtos Naturais do Instituto de Química da UNESP campus de Araraquara, SP, 04/04/02.
8. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, visita para Avaliação de Projetos Verde-amarelo na UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, laboratório do Prof. Eliezer Basseiro, Laboratório LASSBIO (Desenvolvimento de novos inibidores de COX2) e Sérgio Ferreira, Bioquímica Médica, Desenvolvimento de novos compostos anti-Alzheimer, Rio de Janeiro, RJ, 11-12/04/02.
9. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou de reunião com o advogado e engenheiro químico Lucas Martins Gaiarsa, no escritório Gusmão & Labrunie S/C Ltda., para discutir aspectos de patente do Centro de Biotecnologia Molecular Estrutural, São Paulo, SP, 19/06/02.
10. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou de reunião de trabalho na empresa Eurofarma Laboratórios Ltda. relativa à execução do projeto de pesquisa intitulado "Desenvolvimento de Drogas Anti-inflamatórias pela Inibição Específica da Enzima Prostaglandina Endoperoxídeo Sintase-2 (PGHS-2 ou COX-2)", São Paulo, SP, 19/06/02.
11. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou de reunião na Fiocruz com a empresa Pfizer, Rio de Janeiro, RJ, 09-11/09/02.
12. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, representante do IFSC na organização do Stand na FEALTEC/200216, SENAC, São Carlos, SP, 20/10/02.
13. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, visita a laboratórios franceses em Toulouse e Lille, missão de trabalho referente ao projeto CAPES/COFECUB nº 294/99/01-II, 15-24/10/02.
14. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou da reunião de trabalho na empresa Eurofarma Laboratórios Ltda. Relativa à execução do projeto de pesquisa intitulado "Desenvolvimento de Drogas Anti-inflamatórias pela Inibição Específica da Enzima Prostaglandina Endoperoxídeo Sintase-2 (PGHS-2 ou COX-2)", São Paulo, SP, 01/11/02.
15. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, membro da International Society for computational Biology – ISCB, 07/11/02.
16. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou de reunião do Centro de Biotecnologia Molecular Estrutural – CBME/CEPID, no LNLS, Campinas, SP, 14/11/02.
17. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, reunião no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), com o Prof. Sérgio Ferreira, Campinas, SP, 22/11/02.
18. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, visita para Avaliação de Projetos FINEP Verde-amarelo no Laboratório do Prof. Dr. José Pedrazzoli Jr., coordenador dos projetos de estudos farmacológicos e toxicológicos de novos fármacos da Universidade de São Francisco, Bragança Paulista, SP, 28/11/02.
19. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, visita ao Laboratório de Produtos Naturais do Instituto de Química da UNESP (campus de Araraquara), Profa. Vanderlan Bolzani, para discussão de projeto de pesquisa em colaboração, Araraquara, SP, 12/12/02.

Dulce Helena Ferreira de Souza

1. Dra. Dulce Helena Ferreira de Souza, realizar experimentos de difração de raios-x no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS, Campinas, SP, 05-06/09/02.
2. Dra. Dulce Helena Ferreira de Souza, participou da reunião da Rede de Biologia Molecular Estrutural, SmolBnet/FAPESP, na FAPESP, São Paulo, SP, 01-02/12/02.

Participação em Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais

Congresso e Evento Internacional

Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano

1. Prof. Dr. Eduardo Ernesto Castellano, Third International Conference on Supramolecular Science and Technology, onde apresentarei o trabalho intitulado "Supramolecular Interactions: single crystal X-ray diffraction studies of their importance in Coordination Chemistry related to chelate therapy and in complexes of some calyx [4] arene derivatives with metal ions, Buenos Aires, Argentina, 23-30/08/02.

Prof. Dr. Glaucius Oliva

1. Prof. Dr. Glaucius Oliva, Simpósio Drugs Against Tropical Protozoan Parasites: Target Selection, structural Biology and Rational Medical Chemistry, Keystone, Colorado, EUA, 02 a 09/03/02.

Prof. Dr. Igor Polikarpov

1. Prof. Dr. Igor Polikarpov, coordenar a mesa redonda intitulada "Tendências e Novas Oportunidades do Mercado de Produtos Naturais", que faz parte do Workshop "Descoberta de Novos Fármacos no Novo Milênio: perspectivas e oportunidades" na 25ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química. Poços de Caldas, MG, 20/05/02.
2. Prof. Dr. Igor Polikarpov, Workshop, "Forças Hidrofóbicas", no Hotel Marinhá, promovido pela Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, 23-26/04/02.

Prof. Dr. Javier Alcides Ellena

1. Prof. Dr. Javier Alcides Ellena, XIX Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, Kenes International Cares for your Organization, Global Congress Organizers and Association Management Services, Palexpo, Geneva, Switzerland, 06 a 15/08/02.

Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann

1. Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, Simpósio Drugs Against Tropical Protozoan Parasites: Target Selection, Structural Biology and Rational Medicinal Chemistry, onde apresentará o trabalho intitulado "Crystallization and inhibitor screenings of Leishmania adenine phosphoribosyltransferase" em forma de painel e a palestra Rational Sedign and Biodiversity in the Search of New Anti-Chagasic Drugs, Keystone, Colorado, EUA, 02-09/03/02.

Prof. Dr. Richard Charles Garratt

1. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, Simpósio Drugs Against Tropical Protozoan Parasites: Target Selection, Structural Biology and Rational Medicinal Chemistry, onde apresentará o trabalho intitulado "Use of flavivirus for the novel expression of epitopes for immunization against other infectious agents including malaria" em forma de painel, Keystone, Colorado, USA, 02-08/03/02.
2. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, XXXI National Congress & Biophysics, Argentina, Buenos Aires, 04-06/12/02.
3. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, Workshop in Molecular Modeling in Biophysics, methods and applications. Satellite meeting of the 2002 IUPAB International Biophysics Congress, Rio de Janeiro RJ, 03-05/05/2002.
4. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou da XXXI Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular (SBBq), Caxambu, MG, 18 a 22/05/2002.
5. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou da Escola de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos, no Laboratório Nacional de Computação Científica – LNCC, Petrópolis, RJ, 11-12/08/02.
6. Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou da VI Reunião regional da SBBq – Nordeste, Fortaleza, CE, 06-09/11/02.

Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas

1. Profa. Yvonne Primerano Mascarenhas, XIX Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, Kenes International Cares for your Organization, Global Congress Organizers and Association Management Services Palexpo, Geneva, Switzerland, 06 a 15/08/02.

Congresso e Evento Nacional

Prof. Dr. Glaucius Oliva

1. Prof. Dr. Glaucius Oliva, 25ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química (20 a 23/05), Coordenar a mesa redonda intitulada "Tendências e Novas Oportunidades do Mercado de Produtos Naturais", que compunha o Workshop "Descoberta de novos fármacos no novo milênio: perspectivas e oportunidades", Poços de Caldas, MG, 20/05/02.
2. Prof. Dr. Glaucius Oliva, Workshop "A Física na Biologia: de clones a novos fármacos" IFSC/USP, 08/06/02.
3. Prof. Dr. Glaucius Oliva, XXIX Annual Meeting in Basic Research in Chagas Disease e XVIII Annual Meeting of the Brazilian Society of Protozoology, Apresentar poster intitulado "Crystal Structure of Adenine phosphoribosyltransferase from Leishmania tarentolae: Proposal of a Novel Catalytic Mechanism", Caxambú, MG, 04 a 07/11/02.
4. Prof. Dr. Glaucius Oliva, Inter-American Workshop on the use of Synchrotron Radiation: Applications to Macromolecules and Biological Systems, LNLS/Campinas, SP, 09-11/12/03.
5. Glaucius Oliva, 48o. Congresso Nacional de Genética organizado pela Sociedade Brasileira de Genética (SBG), Hotel Monte Real Resort, Águas de Lindóia, SP, 17-20/09/02.
6. Glaucius Oliva, Workshop on Trends and Applications of Combinatorial Chemistry and Combinatorial Technologies, no Colina Verde em São Pedro, SP, 20 a 23/11/02.

Prof. Dr. Igor Polikarpov

1. Prof. Dr. Igor Polikarpov, Desenvolvimento do projeto científico de construção de dispositivo de inserção (Wiggler) e uma linha MAD no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), Campinas, SP, 27/05/2002.
2. Prof. Dr. Igor Polikarpov, X Encontro Brasileiro de Tíride, Centro de Convenções de Ribeirão Preto, SP, 30/05 a 02/06/02.

- Prof. Dr. Igor Polikarpov, participou da XXXI Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular (SBBq), organizar um simpósio "Biologia Molecular Estrutural e Aplicações Biomédicas". Caxambu, MG, 18 a 22/05/02.
- Prof. Dr. Igor Polikarpov, participou da Reunião Anual de Usuários do LNLS, Campinas, SP, 04-05/02/02.
- Prof. Dr. Igor Polikarpov, participou do Encontro Brasileiro de Tireóide, organizado pela Sociedade Brasileira de Endocrinologia e Metabologia, Departamento de Tireóide (SBEM), no Centro de Convenções, Ribeirão Preto, SP, 30/05/02.
- Prof. Dr. Igor Polikarpov, proferir seminário "Hydration Forces in Proteins Folding and Proteins Interactions: Osmotic and Hydrostatic Pressure Approaches", no Satellite Meeting of the XIV International Biophysics Congress, no Marina Palace Hotel, promovido pela Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ, 23-26/04/02.
- Prof. Dr. Igor Polikarpov, Inter-American Workshop on the use of Synchrotron Radiation: Applications to Macromolecules and Biological Systems - IAWS-, Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS, Campinas, SP, 10-11/12/02.

Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann

- Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou da XXXI Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular (SBBq), Caxambu – MG 18 a 22/05/2002 .
- Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, XXIX Reunião Anual de Pesquisa Básica em Doença de Chagas, Caxambu , MG, 04-06/11/02.
- Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, XVIII Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Protozoologia (SBPz), Caxambu, MG, 03-07/11/02.
- Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann, participou do VI Workshop de Pós-Graduação em Física do IFSC/USP, São Carlos, SP, como avaliador, 25-27/09/02.

Prof. Dr. Richard Charles Garratt

- Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou da Escola de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos, no Laboratório Nacional de Computação Científica-LNCC, Petrópolis, RJ, 11-12/08/02.
- Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou do VI Workshop de Pós-Graduação em Física do IFSC/USP, São Carlos, SP, como avaliador, 25-27/09/02.

Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas

- Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas, 2o. Workshop Internacional de Educação a distância na USP, promovido pela Pró-Reitoria de Graduação, Pós-Graduação, Pesquisa, de Cultura e Extensão Universitária, CECAE e CCI da USP, São Paulo, SP, 10/09/02.
- Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas, XV Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais, CBECIMAT, Natal, RN, 09-13/11/02.
- Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas, Fotomoléculas / Fotoativa, São Pedro, SP, 28/11/02.

Dra. Dulce Helena Ferreira de Souza

- Dra. Dulce Helena Ferreira de Souza, participou da XXXI Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular, Caxambu, MG,. Apresentação de trabalhos na forma de pôster: Bioinformatic applied in studies of the enzymes involved in the biosynthesis of the exopolysaccharide, fastidious gum, produced by *Xylella fastidiosa* e Studies of the interaction of fatty acids with Lys49-PLA2 by X-ray diffraction, 18-21/05/02.
- Dra. Dulce Helena Ferreira de Souza, participou do VI Workshop de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos, da USP, como avaliadora 25-27/09/02.

Cursos Frequentados

Especialização

- Prof. Dr. Javier Alcides Ellena, participou do curso de gerenciamento do programa Ewald na empresa Bucker Nonius, Delft , Holanda, 17-22/08/02.
- Prof. Dr. Richard Charles Garratt, participou do curso "A Dinâmica da Inovação Farmacêutica", no Instituto Butantan, São Paulo promovido pela AGIF – Agência de Gestão de Inovação. (Indicado pela Pró-Reitoria de Pesquisa USP - SP), 09-13/09/02.
- Dra. Dulce Helena Ferreira de Souza, participou do curso de Proteção Radiológica, oferecido pelo Instituto de Física de São Carlos, IFSC, perfazendo um total de 40 horas. PALESTRANTE: Sr. Valter S. Paes - Físico da Divisão de Gene e Segurança do Trabalho do Hospital Universitário da USP, São Carlos, SP, 21-30/08/02 Agosto de 2002.

Acordos e Protocolos de Cooperação Científica com outras Instituições

Prof. Dr. Glaucius Oliva e Prof. Dr. Richard Charles Garratt

- Definição de Estratégias para Pesquisa e Desenvolvimento de Novos Fármacos no Brasil, Eurofarma Laboratórios Ltda., julho/1998 a outubro/2003.

Patentes

- Galler, R., Bonaldo, M. & **Garratt, R.C.** Use of flavivirus for the expression of protein epitopes and development of new live attenuated vaccine virus to immunize against flavivirus and other infectious agents, The Patent Office, UK, No. GB 0105877.5, 09/03/01.
- Galler, R., Bonaldo, M. & **Garratt, R.C.** Use of flavivirus for the expression of protein epitopes and development of new live attenuated vaccine virus to immunize against flavivirus and other infectious agents, Patent Cooperation Treaty, Genebra, No. PCT/BR02/00036, 08/03/02.
- Galler, R., Bonaldo, M. & **Garratt, R.C.** Use of flavivirus for the expression of protein epitopes and development of new live attenuated vaccine virus to immunize against flavivirus and other infectious agents, Tailândia, No. TH 072236, 08/03/02.
- Tendler, M., **Garratt, R.C.**, Katz, N., Simpson, A.J.G., Barrientos, F.J.A., Vilar, M.M. & Almeida, M.S.S. Synthetic Active Peptide Fragments, USPTO, No. US10/113,946, 02/04/02.
- Garratt, R.C.** & Abel, L.D.S. Models for the representation of protein structures. (EM ELABORAÇÃO).

Espectroscopia de Sólidos

ÍNDICE

GRUPO DE PESQUISA: ESPECTROSCOPIA DE SÓLIDOS	118
A. PRINCIPAIS INDICADORES DE DESEMPENHO E OUTROS DADOS RELEVANTES	118
B. PRÊMIOS E DISTINÇÕES	118
C. ATIVIDADES DE PESQUISA	118
Recursos Humanos	118
Linhas de Pesquisa	119
Publicações	120
Recursos Financeiros – Projetos de Pesquisa	122
Bolsas Produtividade em Pesquisa	123
D. ATIVIDADES ACADÊMICAS E DE EXTENSÃO UNIVERSITÁRIA	123
Atividades Didáticas	123
Orientação Acadêmica e Bolsistas	123
Teses e Dissertações Concluídas por Docentes e Alunos	125
Participação em Comissões Julgadoras no IFSC	125
Participação em Comissões Julgadoras Externas ao IFSC	125
Promoção e Organização de Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais	126
Assessoria no Julgamento e Avaliação de Projetos	126
Responsabilidade de Docentes do FFI no Setor de Infra-Estrutura do IFSC	126
Representação e Participação em Comissões no IFSC	126
Participação em Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais	127
Atividades de Extensão	127

Grupo de Pesquisa: ESPECTROSCOPIA DE SÓLIDOS**A. Principais Indicadores de Desempenho e Outros Dados Relevantes**

Uma das principais linhas de pesquisa desenvolvida no Laboratório de Espectroscopia Óptica é o estudo de novos materiais que apresentem interesse tecnológico para a confecção de dispositivos fotônicos.

B. Prêmios e Distinções

Placa de agradecimento da APROF – Associação dos Professores de Física pela colaboração e empenho na Escola Avançada de Física, realizada no IFSC.

C. Atividades de Pesquisa**Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes**

Trabalhando em espectroscopia de sólidos: cristais e vidros dopados com terras raras, semicondutores e semicondutores amorfos, utilizando as técnicas de espectroscopia convencional (absorção, luminescência, excitação, medida de tempos de vida, etc.), espectroscopia Raman e espectroscopia resolvida no tempo.

Prof. Dr. Tomaz Catunda

Continuidade a linha de pesquisa em Espectroscopia não-linear em Sólidos dopados, que está relacionada a orientação de 5 alunos de pós-graduação, 1 bolsista treinamento técnico FAPESP e dois projetos de pesquisa FAPESP em vigor. Além disso, coordena o projeto de Ensino Público (FAPESP) com a participação de 10 (dez) professores da rede pública, em colaboração com o IFUSP – Prof. Dr. Mikiya Muramatsu. Continua prestando assessoria à Estação Ciência, coordenada pelo Prof. Ernest Hamburger (IFUSP/Estação Ciência).

Recursos Humanos**Docentes**

1. **Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes**, Professor Doutor - Coordenador do Grupo de Espectroscopia de Sólidos, Universidade Federal do Pará – 1977-1980 – Graduação em Bacharelado em Física; Universidade de São Paulo – 1981-1982 – Mestrado em Física Aplicada; Universidade de São Paulo – 1985-1988 – Doutorado em Física; Bell Communication Research – 1990-1991 – Pós-doutorado.
2. **Prof. Dr. Tomaz Catunda**, Professor Associado, Universidade de São Paulo – 1978-1982 – Graduação em Física; Universidade de São Paulo – 1982-1984 – Mestrado em Física Aplicada; Universidade de São Paulo – 1985-1989 – Doutorado em Física Aplicada; Massachusetts Institute of Technology – 1990-1992 – Pós-Doutorado; Universidade de São Paulo – 1997 – Livre-Docência.

Técnicos

1. Josimar Luiz Sartori - Técnico de Nível Médio
2. João Fernando Possatto – Técnico de Nível Superior
3. Rui Carlos Pietronero - Técnico de Nível Médio

Administração

2. Ester Souza Apóstolo da Silva – Secretária

Colaboradores Externos

- Dan Hewak - Southampton, Reino Unido
- Prof. Dr. Sergio Gama - UNICAMP
- Prof. Marian Dalvolos e Y. Messaddeq - IQ- UNESP/Araraquara
- Prof. Dr. Mauro Baesso - Depto. de Física / UEM - Universidade Estadual de Maringá
- Prof. Dr. Antônio Carlos Bento - Depto. de Física / UEM - Universidade Estadual de Maringá
- Prof. Dr. Luiz Carlos Miranda - INPE
- Prof. Dr. Mikiya Muramatsu - IFUSP

- Prof. Dr. Ernst Hamburger – IFUSP/Estação Ciência
- Dr. Hans P. Jenssen – CREOL, EUA
- Dra. Arlete Cassanho – VLOC, EUA
- Dr. Antônio Carlos de Camargo Andrade Filho (Hospital Amaral Carvalho)

Linhas de Pesquisa

Título 1: "Espectroscopia Não Linear de Sólidos Dopados"

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Tomaz Catunda - Docente
- Alunos de doutorado: Acácio Aparecido de Castro Andrade e Sandro Márcio Lima; (FAPESP); Viviane Pilla e Juraci Sampaio (CNPq)

Agência Financiadora:

- FAPESP, CNPq.

Objetivos: Estudo de sólidos (cristais e vidros) dopados com metais de transição (principalmente o Cr) e terras raras. Estamos utilizando as técnicas Lente Térmica de modo descasado e Z-scan resolvido no tempo. Com estas técnicas podemos medir o índice de refração não-linear complexo (n_2), intensidade de saturação, tempo de vida de estados metaestáveis, e propriedades termo-ópticas: difusividade térmica, dn/dT e eficiência quântica de fluorescência.

Resultados: Fizemos medidas em vidros fluoretos (dopados com Co e Nd) preparados no IFSC, vidros de aluminato de cálcio preparados na UNICAMP, e cristais fluoretos preparados na VLOC. Em colaboração com o grupo de Espectroscopia Fototérmica de Maringá, desenvolvemos um novo método para medida de eficiência quântica em sólidos dopados.

Título 2: "Desenvolvimento de Materiais para Laser"

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes - Docente
- Dione Fagundes de Souza, Pós-doutorado, FAPESP.

Agência Financiadora:

- FAPESP

Objetivos: Desenvolver novos meios ativos para confecção de lasers de estado sólido bombeados por laser de diodo.

Resultados: Laboratório de Espectroscopia está desenvolvendo/ confeccionando o primeiro protótipo de laser inteiramente nacional.

Título 3: "Ensino de Óptica Moderna para Segundo Grau"

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Tomaz Catunda – Docente
- Gláucia G. da Costa – aluna de doutoramento (CNPq)
- André Luis do Santos Romero - estagiário técnico de segundo grau.

Agência Financiadora:

- FAPESP

Objetivos: Este projeto visa investigar o uso de "kits" e demonstrações em sala de aula e avaliar sua contribuição no ensino de óptica de 2o grau. O projeto é feito em colaboração com 3 professores do IFUSP e com 15 professores de segundo grau da rede pública. Mais recentemente, estamos montando uma exposição de Óptica para a Estação Ciência em São Paulo.

Resultados: Estamos desenvolvendo dois tipos de "kits" para serem usados no segundo grau: o "kit" aluno, onde o próprio aluno faz os experimentos em sala de aula (envolvendo óptica geométrica) e o "kit" professor, com o qual o professor faz demonstrações mais avançadas abordando efeitos de óptica física e usando lasers.

Publicações

Artigo Publicado em Periódico - Internacional

1. SOUSA, D F; LEBULLENGER, R; HERNANDES, A C; NUNES, Luiz Antonio de Oliveira. Evidence of higher-order mechanisms than dipole-dipole interaction in Tm^{3+} /SETA Tm^{3+} energy transfer in fluoroindogallate glasses. *Physical Review B - Condensed Matter And Materials Physics*, EUA, v. 65, p. 09420-09420, 2002.
2. LIMA, S M; CAMARGO, A S S; NUNES, L A O; CATUNDA, Tomaz; HEWAK, D W. Fluorescence quantum efficiency measurements of excitation and nonradiative deexcitation processes of rare earth 4f-states in chalcogenide glasses. *Applied Physics Letters*, Melville, v. 81, n. 4, p. 589-591, 2002.
3. LIMA, S M; JIAO, H; NUNES, L A O; CATUNDA, Tomaz. Nonlinear refraction spectroscopy in resonance with laser lines in solids. *Optics Letters*, Washington, v. 27, n. 10, p. 845-847, 2002.
4. PELIÇON, E; ROHLING, J H; MEDINA, A N; BENTO, A C; BAESSO, M L; SOUZA, D F de; OLIVEIRA, S L; SAMPAIO, J A; LIMA, S M; NUNES, L A O; CATUNDA, Tomaz. Temperature dependence of fluorescence quantum efficiency of optical glasses determined by thermal lens spectrometry. *Journal of Non-Crystalline Solids*, Amsterdam, v. 304, p. 244-250, 2002.
5. SAMPAIO, J A; LIMA, S M; CATUNDA, Tomaz; MEDINA, A N; BENTO, A C; BAESSO, M L. Thermal lens versus DTA measurements for glass transition analysis of fluoride glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids*, Amsterdam, v. 304, p. 315-321, 2002.
6. CATUNDA, Tomaz; PILLA, V; BALOGH, D T; FARIA, R M; ZILIO, S C. Thermal lensing in poly (vinyl alcohol) / polyaniline blends. *Journal Of Polymer Science Part B-Polymer Physics*, New York, v. 40, n. 17, p. 1949-1956, 2002.
7. MEDINA, A N; CALDEIRA, A M F; BENTO, A C; BAESSO, M L; SAMPAIO, J A; CATUNDA, Tomaz; GANDRA, F G. Thermal relaxation method to determine the specific heat of optical glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids*, Amsterdam, v. 304, p. 299-305, 2002.

Trabalhos Apresentados em Eventos - Nacional

1. CAMARGO, A S S; NUNES, Luiz Antonio de Oliveira; LIMA, S M; CATUNDA, T; HEWAK, D A. A broad look into the spectroscopy of GaLaS chalcogenide glass doped with Nd 3. In: ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA, 2002, Caxambu. 2002. p. 261-261.
2. OLIVEIRA, S L; SOUZA, D F; HERNANDES, A C; NUNES, Luiz Antonio de Oliveira; FLOREZ, A. Análise da teoria de Judd-Ofelt e dos mecanismos de transferência de energia entre íons Pr^{3+} no sistema vítreo fluoroindogalato. In: ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA, 2002, Caxambu. 2002. p. 240-241.
3. BELL, M J V; OLIVEIRA, S L; SOUSA, D F; NUNES, Luiz Antonio de Oliveira. Cooperative up-conversion in Yb^{3+} doped phosphate glasses. In: ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA, 2002, Caxambu. 2002. p. 260-260.
4. CAMARGO, A S S; OLIVEIRA, S L; SOUSA, D F; NUNES, Luiz Antonio de Oliveira; HEWAK, D. Spectroscopic properties and energy transfer parameters of Tm^{3+} ions in GaLaS chalcogenide glass. In: ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA, 2002, Caxambu. 2002.
5. ANDRADE, A A; SOUZA, D F; NUNES, Luiz Antonio de Oliveira; CATUNDA, T. Thermal Lens measurements of energy transfer upconversion. In: ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA, 2002, Caxambu. 2002. p. 349-349.
6. ANDRADE, A A; SOUZA, D F; NUNES, Luiz Antonio de Oliveira; CATUNDA, T. Thermal lens measurements of energy transfer upconversion 'Nd POT_3^{3+} doped solids. In: ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA, 2002, Caxambu. 2002.
7. CATUNDA, Tomaz; ANDRADE, Acácio Aparecido C.; SOUZA, D F de; NUNES, L A O. Thermal lens measurements of energy transfer upconversion 'Nd POT_3^{3+} doped solids. In: XXV ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA, 2002, Caxambu. *Annals of Optics*. 2002.
8. CATUNDA, Tomaz; CAMARGO, A S S; NUNES, L A O; LIMA, S M; HEWAK, D. A broad look into the spectroscopy of GaLaS chalcogenide glass doped with 'Nd POT_3^{3+} '. In: XXV ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA, 2002, Caxambu. *Resumos*. 2002. p. 261.
9. CATUNDA, Tomaz; ANDRADE, Acácio Aparecido C.; MARLETTA, A; FARIA, R M. Multi-wavelength thermal lens determination of photoluminescence quantum efficiency of poly

(p-phenylene-vinylene) films. In: XXV ENCONTRO NACIONAL DE FISICA DA MATERIA CONDENSADA, 2002, Caxambu. Resumos. 2002. p. 418.

10. CATUNDA, Tomaz; ANDRADE, Acácio Aparecido C.; SOUZA, D F de; NUNES, L A O. Thermal Lens measurements of energy transfer upconversion. In: XXV ENCONTRO NACIONAL DE FISICA DA MATERIA CONDENSADA, 2002, Caxambu. Resumos. 2002. p. 349.

Trabalho Apresentado em Evento – Internacional

1. CATUNDA, Tomaz; ANDRADE, Acácio Aparecido C.; MURA, J; BAESSO, M L. Determination of the temperature coefficient of optical path length using the thermal lens method. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON PHOTOACUSTIC AND PHOTOTHERMAL PHENOMENA, 12, 2002, Toronto. Book of abstracts. 2002. p. 259.
2. CATUNDA, Tomaz; RODRIGUES, A. Lousa ótica. In: X SIMPÓSIO INTERNACIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, 2002, São Carlos. Resumos. 2002. v. r2009.
3. CATUNDA, Tomaz; MAIELLO, A. Projeto de fontes de corrente para diodos de laser visíveis. In: X SIMPÓSIO INTERNACIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, 2002, São Carlos. Resumos. 2002. v. r2012.
4. CATUNDA, Tomaz; ANDRADE, Acácio Aparecido C.; LIMA, S M; PILLA, V; SAMPAIO, J A; BAESSO, M L. Thermal lens for fluorescence quantum efficiency measurements in optical materials. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON PHOTOACUSTIC AND PHOTOTHERMAL PHENOMENA, 12, 2002, Toronto. Book of abstracts. 2002. p. 260.
5. CATUNDA, Tomaz; PILLA, V; BALOGH, D T; FARIA, R M. Thermal-lens study of thermo-optical and spectroscopic properties of polyaniline. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON PHOTOACUSTIC AND PHOTOTHERMAL PHENOMENA, 12, 2002, Toronto. Book of abstracts. 2002. p. 254.

Recursos Financeiros – Projetos de Pesquisa

1. "RESERVA TÉCNICA DE PÓS-GRADUAÇÃO, Doutorado – ACÁCIO APARECIDO DE CASTRO ANDRADE", Coordenador: TOMAZ CATUNDA, Agência financiadora: FAPESP - processo nº 1997/12498-9. Duração: 01/09/98 a 31/08/2002 – Valor: R\$ 24.264,00 (TOTAL CONCEDIDO DURANTE A VIGÊNCIA DA BOLSA)
2. "RESERVA TÉCNICA DE PÓS-GRADUAÇÃO, Doutorado - ANDRÉA STUCCHI DE CAMARGO", Coordenador: Prof.Dr. PROF. DR. LUIZ A.O. NUNES, Agência financiadora: FAPESP processo nº 1998/01833-7, Duração: 01/08/99 a 31/07/2003 - Valor : R\$ 24.264,00 (TOTAL CONCEDIDO ATÉ 31/12/2002)
3. "RESERVA TÉCNICA DE PÓS-GRADUAÇÃO, Doutorado - SANDRO MÁRCIO LIMA", Coordenador: TOMAZ CATUNDA, Agência financiadora: FAPESP - processo nº 1998/13856-9. Duração: 01/03/99 a 28/02/2003 - Valor: R\$ 24.264,00 (TOTAL CONCEDIDO DURANTE A VIGÊNCIA DA BOLSA)
4. "RESERVA TÉCNICA DE PÓS-GRADUAÇÃO, Doutorado – CARLOS JACINTO DA SILVA", Coordenador: TOMAZ CATUNDA, Agência financiadora: FAPESP - processo nº 2001/14630-9. Duração: 01/04/2002 a 28/02/2005 - Valor concedido R\$ 5.148,00 (TOTAL ANUAL – 1^o. ANO BOLSA)
5. "RESERVA TÉCNICA DE PÓS-GRADUAÇÃO, Doutorado – DJALMIR NESTOR MESSIAS", Coordenador: TOMAZ CATUNDA, Agência financiadora: FAPESP - processo nº 2002/00735-6. Duração: 01/04/2002 a 28/02/2005 - Valor concedido R\$ 5.148,00 (TOTAL ANUAL – 1^o. ANO BOLSA)
6. "RESERVA TÉCNICA DE PÓS-GRADUAÇÃO, Doutorado - SAMUEL LEITE DE OLIVEIRA, Coordenador: LUIZ A.O. NUNES, Agência financiadora: FAPESP - processo nº 99/12726-7. Duração: 01/03/2000 a 31/01/2004 – Valor: R\$ 16.830,00 (TOTAL CONCEDIDO ATÉ 31/12/2002)
7. AUXÍLIO PESQUISA – "ESPECTROSCOPIA ÓPTICA DE FIBRAS CRISTALINAS", Coordenador: LUIZ A.O. NUNES, Agência Financiadora: FAPESP – processo no. 99/06830-6. Duração: 01/01/2000 a 30/03/2002 – Valor concedido: R\$ 36.327,56 e US\$ 69.200,00
8. AUXÍLIO PESQUISA – "MEDIDAS DE ABSORCAO DE ESTADO EXCITADO E GANHO OPTICO EM MATRIZES VITREAS DOPADAS COM IONS TERRAS-RARAS", Coordenador: LUIZ A.O. NUNES, Agência Financiadora: FAPESP – processo no. 2001/02854-0. Duração: 01/08/2001 a 31/07/2002 – Valor concedido: R\$ 19.318,56 e US\$ 23.233,00
9. RECURSOS COMPLEMENTARES PARA APOIO A GRUPOS DE PESQUISA - "MEDIDAS DE ABSORÇÃO DE ESTADO EXCITADO E GANHO OPTICO EM MATRIZES VITREAS DOPADAS COM IONS TERRAS-RARAS" - Coordenador: LUIZ A. O. NUNES - PRÓ-REITORIA DE PESQUISA/USP – Valor Concedido: R\$ 3.500,00, Ano Base: 2002.
10. AUXÍLIO PESQUISA – "ESPECTROSCOPIA ÓPTICA EM SÓLIDOS DOPADOS III", Coordenador: TOMAZ CATUNDA, Agência Financiadora: FAPESP – processo no. 99/07063-0. Duração: 01/04/2000 a 31/03/2004 – Valor Concedido: R\$ 35.065,47 e US\$ 76.172,80.
11. AUXÍLIO PESQUISA – "ONDAS E OTICA MODERNA NO ENSINO PUBLICO – PARTE II", Coordenador: TOMAZ CATUNDA, Agência Financiadora: FAPESP – processo no. 2000/06850-6. Duração: 01/09/2001 a 30/08/2004 – Valor Concedido: R\$ 78.400,00 e US\$ 3.000,00.
12. RECURSOS COMPLEMENTARES PARA APOIO A GRUPOS DE PESQUISA - "ONDAS E OTICA MODERNA NO ENSINO PUBLICO – PARTE II" - Coordenador: TOMAZ CATUNDA - PRÓ-REITORIA DE PESQUISA/USP – Valor Concedido: R\$ 3.500,00, Ano Base: 2002.

Bolsas Produtividade em Pesquisa

3. Prof. Dr. Tomaz Catunda, nível II-B, julho 1997 a fevereiro de 2004
4. Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes, Nível I-C, junho 1990 a fevereiro 2006.

D. Atividades Acadêmicas e de Extensão Universitária

Atividades Didáticas

Graduação

-  **Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes**
1. SLC597 – Estrutura da Matéria (Teórica, Anual, 60 h)
 2. SLC570 - Prática de Ensino de Física (Teórica, Anual, 60 h)
-  **Prof. Dr. Tomaz Catunda**
1. FCM401 - Física B (Teórica, Anual, 60 h)
 2. FCM401 - Física B (Prática, Anual, 120 h)
 3. FCM156 - Óptica (Teórica, Semestral, 60h)

Pós-Graduação

-  **Prof. Dr. Tomaz Catunda**
1. SFI5799 Óptica não-Linear (2^o. semestre, 30h)

Orientação Acadêmica e Bolsistas

Pós-Doutoramento

-  **Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes**
1. Dione Fagundes de Sousa, "Medidas de absorção de estado excitado e ganho óptico em matrizes vitreas dopadas com íons terras-raras", FAPESP, 01/02/2001 a 30/04/2002.

Doutoramento

-  **Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes**
1. Andréa Simone Stucchi de Camargo, "Espectroscopia óptica de fibras monocristalinas de YAg, YvO4, GvO4 dopadas com íons terras raras e de Al2O3 dopadas com Ti3+", FAPESP (01/08/99 a 31/07/2003).
 2. Samuel Leite de Oliveira, "Espectroscopia óptica de vidros de fluorofosfatos dopadas com íons terras raras", FAPESP (01/04/2000 a 31/01/2003).

3. Paulo César de Souza, "Determinação de poluentes utilizando técnicas espectroscópicas", SEM BOLSA (02/09/2002 a 01/09/2005).

 Prof. Dr. Tomaz Catunda

1. Acácio Aparecido de Castro Andrade, "Estudo do índice de refração não-linear em cristais e vidros fluoretos dopados", FAPESP (01/09/98 a 31/08/2002).
2. Sandro Márcio Lima, "Espectroscopia de lente térmica e lente de população em sólidos dopados com íons terras-raras", FAPESP (01/03/99 a 28/02/2003).
3. Gláucia Grüninger da Costa, CNPq (Março/2000 a Fevereiro/2004)
4. Carlos Jacinto da Silva, "Novas aplicações da espectrometria de lente térmica em materiais", FAPESP (01/04/2002 a 28/02/2005).
5. Djalmir Nestor Messias, "Espectroscopia fototermica e não-linear em sólidos dopados", FAPESP (01/04/2002 a 28/02/2005).

Mestrado

 Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes

1. Alessandra Riposati Arantes, "Elaboração de um material paradidático: textos e experimentos", CAPES (27/07/99 a 15/03/2002).
2. Daniel Leandro Rocco, CNPq (01/03/00 a 01/02/2002).

Iniciação Científica

 Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes

1. Renata Siqueira, "Desenvolvimento de material didático com o objetivo de conectar o aprendizado de sala de aula com o dia a dia", FAPESP (01/05/2001 a 30/04/2003 – orientador solicitou cancelamento da bolsa em 12/06/2002)
2. Thays Grabielle Wenzel Ferreira Cavaglieri, "O ensino de física e o cotidiano", CNPq (Agosto/2001 a Julho/2002).

Aperfeiçoamento (Treinamento Técnico Alunos Graduação)

 Prof. Dr. Tomaz Catunda

1. Ariane Baffa Lourenço, "Desenvolvimento de instrumentação eletrônica para espectroscopia", Bolsa para Treinamento de Estudantes de Graduação em Técnicas Especializadas – Pró-Reitoria de Pesquisa/USP (04/06/2001 a 03/06/2002)
2. Silmara Penha Dantas, Bolsa Trabalho, COSEAS/USP (01/05/2001 a 30/04/2002).

Treinamento Técnico

 Prof. Dr. Tomaz Catunda

1. Anderson Maiello, "Ondas e ótica moderna no ensino público – parte III", FAPESP - TT1 (01/09/2002 a 01/02/2003).
2. Arnaldo Rodrigues, "Ondas e ótica geométrica no ensino publico – parte II", FAPESP - TT1 (01/03/2002 a 29/02/2004).

Teses e Dissertações Concluídas por Docentes e Alunos

Doutorado

 Prof. Dr. Tomaz Catunda

1. Acácio Aparecido de Andrade, "Preparação e Caracterização de Vidros Aluminato de Cálcio com Baixa Concentração de Silica Dopados com Nd₂O₃ e Er₂O₃", FAPESP (01/09/1998 a 31/08/2002)

Mestrado

 Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes

1. Alessandra Riposati Arantes, "Elaboração de um material paradidático: textos e experimentos", CAPES (27/07/99 a 15/03/2002).
2. Daniel Leandro Rocco, "Estudo Espectroscópico dos Vidros Sódio Aluminofosfatos: Matrizes não Dopadas e Dopadas com Eu³⁺ e Nd³⁺", CNPq (01/03/00 a 01/02/2002).

Participação em Comissões Julgadoras no IFSC

Tese de Doutorado

 Prof. Dr. Tomaz Catunda

1. Acácio Aparecido de Andrade, "Preparação e Caracterização de Vidros Aluminato de Cálcio com Baixa Concentração de Silica Dopados com Nd₂O₃ e Er₂O₃", FAPESP, 28/10/2002.

Dissertação de Mestrado

 Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes

1. Alessandra Riposati Arantes, "Elaboração de um material paradidático: textos e experimentos", CAPES, 15/03/2002.
2. Daniel Leandro Rocco, "Estudo Espectroscópico dos Vidros Sódio Aluminofosfatos: Matrizes não Dopadas e Dopadas com Eu³⁺ e Nd³⁺", CNPq, 14/05/2002

 Prof. Dr. Tomaz Catunda

1. Paulo Licênio Franzen, "Propriedades ópticas não-lineares de oligômeros de anilina", 29/10/2002
2. Aparecido Rodrigues da Silva, "Confeção e Caracterização Óptica e Estrutural de Lentes Plásticas Obtidas pelo Processo de Injeção", 19/12/2002.

Efetivação

 Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes

1. Concurso para Professor Doutor na área de Cristalografia de Pequenas Moléculas, junto ao Departamento de Física e Informática, de acordo com o Edital no ATAc/IFSC/029/2001, de 02/10/2001.

Participação em Comissões Julgadoras Externas ao IFSC

Dissertação de Mestrado

 Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes

1. Luis Presley Serejo dos Santos, "Caracterização Óptica e Estrutural de PbTiO₃ Nanoestruturado Obtido por Moagem Mecânica de Alta Energia", Mestrado em Ciência e Engenharia dos Materiais - Universidade Federal de São Carlos.

 Prof. Dr. Tomaz Catunda

1. Aparecido Rodrigues da Silva, "Confeção e caracterização óptica e estrutural de lentes plásticas obtidas pelo processo de injeção", Mestrado em Ciências e Engenharia de Materiais - Universidade de São Paulo.
2. Anderson Duarte Betitol. "Verificação de Autenticidade de Impressões Digitais em Tempo Real Utilizando-se o Correlator Óptico Compacto". 2002. Dissertação (Mestrado em Engenharia (S.Carlos). Universidade de São Paulo.

Promoção e Organização de Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais

 Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes

1. Escola Avançada de Física, IFSC, 30/06 a 06/07/2002.

Assessoria no Julgamento e Avaliação de Projetos

 Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes

Assessoria FAPESP – 07 pareceres.
Assessoria CNPq – 04 pareceres.
Sociedade Brasileira de Química – Revista Química Nova – 01 parecer

 Prof. Dr. Tomaz Catunda

Assessoria FAPESP – 02 pareceres.
Assessoria CNPq – 03 pareceres.
Árbitro da Revista de Física Aplicada e Instrumentação.
Árbitro da Revista Optics Letter e Journal of Optical Society of America B

Responsabilidade de Docentes do FFI no Setor de Infra-Estrutura do IFSC

 Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes

1. Vice-Chefe do Departamento de Física e Informática do IFSC/USP, 08/05/2000 a 07/05/2004.

 Prof. Dr. Tomaz Catunda

1. Chefe da Oficina Eletrônica do IFSC.

Representação e Participação em Comissões no IFSC

 Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes

1. Membro Titular junto à Comissão de Pós-Graduação, agosto/2002 (em vigor)
2. Representante Titular da Categoria Professor Doutor no Conselho do Depto. de Física e Informática, outubro/2002 (em vigor).
3. Coordenador do Curso de Física Aplicada junto à CPG, 23/08/2002 a 22/08/2004.

 Prof. Dr. Tomaz Catunda

1. Repres. Suplente Categoria Associado - Conselho do Depto. de Física e Informática, outubro/2002 (em vigor) .
2. Repres. Titular Categoria Associado – Congregação, outubro/2002 (em vigor).

Participação em Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais

Congresso Internacional

 Prof. Dr. Tomaz Catunda

1. The 12th International Conference on Photoacoustic and Photothermal Phenomena (ICPPP) - Canadá, 21/06/2002 a 08/07/2002.

Atividades de Extensão

 Prof. Dr. Tomaz Catunda

Há vários anos temos trabalhado na parte de instrumentação para ensino de física experimental: lasers de semicondutor, eletroscópio, experimentos de interferência usando CCD para medida do comprimento de onda da luz, instrumentação com microcomputadores, etc. Mais recentemente, há cerca de seis anos comecei a participar de atividades de extensão universitária com professores de segundo grau da rede pública.

1. "Programa de Pesquisas Aplicadas sobre a Melhoria do Ensino Público no Estado de São Paulo"

Com apoio de Projeto FAPESP - modalidade Ensino Público (2001 a 2004) - coordenador: Prof. Dr. Tomaz Catunda – colaboradores: Prof. Dr. M. Murawatsu (IFUSP) e Prof. Dr. Ernest Hamburger (Estação Ciência).

Este projeto visa o desenvolvimento de "kits" experimentais de óptica para o ensino de óptica moderna em sala de aula. O projeto é feito em parceria com professores (12) de escolas da rede pública que recebem uma bolsa da FAPESP.

2. "Assessoria à Estação Ciência"

A Estação Ciência é um Centro de Divulgação Científica, sem fins lucrativos da Pró-Reitoria de Cultura e Extensão da USP em convênio com o CNPq. A Estação Ciência recebeu verbas da FAPESP e da fundação VITAE para readequação de sua infra-estrutura e modernização do seu acervo

Fazemos demonstrações que ilustram os conceitos básicos de óptica assim como suas principais aplicações.

3. "Curso de Aperfeiçoamento"

Do pessoal docente das escolas públicas do Estado de São Paulo, "Óptica, Ondas e Física Moderna- programa Pró-ciências - Programa Pró-ciências (coordenador M. Muramatsu), 120 horas, maio a novembro de 2002, em Franca - participação de 40 professores da rede pública.

Grupo de Física Teórica

ÍNDICE

GRUPO DE PESQUISA: FÍSICA TEÓRICA	130
A. PRINCIPAIS INDICADORES DE DESEMPENHO E OUTROS DADOS RELEVANTES	130
B. PRÊMIOS E DISTINÇÕES	130
C. ATIVIDADES DE PESQUISA	130
<i>Recursos Humanos</i>	130
<i>Linhas de Pesquisa</i>	132
<i>Publicações</i>	143
<i>Recursos Financeiros – Projetos de Pesquisa</i>	146
<i>Bolsas Produtividade em Pesquisa</i>	149
D. ATIVIDADES ACADÊMICAS E DE EXTENSÃO UNIVERSITÁRIA	149
<i>Atividades Didáticas</i>	149
<i>Atividades de Extensão</i>	150
<i>Orientação Acadêmica e Bolsistas</i>	150
<i>Teses e Dissertações Concluídas por Docentes e Alunos</i>	153
<i>Participação em Comissões Julgadoras no IFSC</i>	153
<i>Participação em Comissões Julgadoras Externas ao IFSC</i>	155
<i>Concursos Realizados pelos Docentes como Candidatos</i>	155
<i>Oferecimento de Estágios, Treinamento de Pessoal, Seminários e Palestras</i>	155
<i>Assessoria no Julgamento e Avaliação de Projetos</i>	157
<i>Serviços à Comunidade</i>	158
<i>Responsabilidade de Docentes do FFI no Setor de Infra-Estrutura do IFSC</i>	158
<i>Representação e Participação em Comissões no IFSC</i>	158
<i>Representação e Participação em Comissões Externas ao IFSC</i>	159
<i>Participação em Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais</i>	160

Grupo de Pesquisa: FÍSICA TEÓRICA

A. Principais Indicadores de Desempenho e Outros Dados Relevantes

A pesquisa desenvolvida no grupo de Física Teórica do Departamento de Física e Informática compreende áreas tradicionais da Física como Matéria Condensada e Partículas, dando ênfase a problemas modernos e desafiadores como supercondutividade e teoria de gauge na rede, bem como áreas de interface com a Biologia, exemplificadas pela pesquisa em evolução molecular e neurobiofísica. Essa diversidade de linhas de pesquisa e atenção aos problemas de fronteira da Ciência tornam o grupo de Física Teórica quase que único no país, atraindo professores visitantes e jovens doutores formados em outros centros do país e do exterior. Como resultado das linhas de pesquisa aqui desenvolvidas, em 2002 houve 15 publicações em periódicos internacionais, sendo 03 delas no Physical Review Letters. Demos continuidade também à colaboração com pesquisadores do Brasil e do Exterior e recebemos no período visitas de pesquisadores do Canadá, Áustria, França, Inglaterra, Alemanha, São Paulo, Bahia, Espírito Santo, Minas Gerais, Pernambuco e Rio de Janeiro. O Grupo recebeu também 2 novos Doutores para desenvolvimento de seus pós-doutorados (totalizando 08 em 2002) e foram concluídas 3 teses de Doutorado e 1 tese de Doutorado em Co-Orientação, e 4 de Mestrado, sendo que alguns dos alunos que defenderam seus trabalhos permaneceram no Grupo como alunos de Doutorado ou como Pós-Doutorandos. Os membros do Grupo participaram ativamente das atividades institucionais, quer como docentes dos cursos de graduação e de pós-graduação, quer como membros dos órgãos Colegiados do Departamento e do Instituto de Física de São Carlos, bem como de Comissões Julgadoras de Concursos, além de seminários e palestras proferidas em outras instituições.

B. Prêmios e Distinções

 **Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira**

1. Ordem Nacional do Mérito Científico, na Classe de Comendador, tendo recebido insígnia e diploma, entregues pelo Presidente da República, no Palácio do Planalto, Brasília, DF, 15/08/2002.

C. Atividades de Pesquisa**Recursos Humanos****Docentes**

1. **Profa. Dra. Aguida Celina de Méo Barreiro**, Doutora pela Universidade de São Paulo (1996), Professora Doutora
2. **Prof. Dr. Djalma Mirabelli Redondo**, Doutor pela Universidade de São Paulo (1969), Professor Doutor (Aposentado).
3. **Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes**, Doutor pela Ohio State University (1996), Professor Doutor, Pós-Doutorado na Universität Basel, Suíça, "Venia Docendi für Physik" (Habilitation), setembro de 2001 a maio de 2003.
4. **Prof. Dr. José Fernando Fontanari**, Doutor (1988) e Livre-docente (1994) pela Universidade de São Paulo, Pós-doutor no California Institute of Technology (1989), Professor Associado.
5. **Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior**, Doutor pela State University of New York at Buffalo (1981), Livre-docente pela Universidade de São Paulo (1989), Professor Associado.
6. **Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira**, Doutor pela Universidade de Cornell (1981), Livre Docente pela Universidade de São Paulo (1984), Pós-doutor na University of Santa Barbara (1988), Professor Titular.
7. **Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody**, Doutor (1984) e Livre-docente (1993) pela Universidade de São Paulo, Professor Associado.
8. **Prof. Dr. Rogério Cantarino Trajano da Costa**, Doutor pela Universidade Federal do Rio de Janeiro (1966), Livre-docente pela Universidade de São Paulo (1979), Professor Associado (Aposentado).
9. **Prof. Dr. Roland Köberle**, Doutor pela Universidade de Chicago (1967), Livre-docente pela Universidade de São Paulo (1972), Pós-doutor no Deutsches Elektronensynchrotron (1972) - Harvard University (1983-1984) - Princeton University/NEC Research Institute (1995-1996), Professor Titular.
10. **Prof. Dr. Silvestre Ragusa**, Doutor pela Universidade de Chicago (1967), Livre-docente pela Universidade de São Paulo (1971), Pós-doutor na NorthWestern University (1979), Professor Associado (Aposentado).
11. **Prof. Dr. Válder Luiz Libero**, Doutor pela Universidade de São Paulo (1989), Pós-doutor na Ohio State University (1991-1992), Professor Doutor.

Administração

- ♦ Maria Cristina Vieira Ligo da Silva – Secretária.

Colaboradores Externos

- ♦ Miled Moussa, UFSCar, São Carlos, SP, com Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes.

- Nitin Samarth, Penn State University, EUA, com Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes.
- Antti-Pekka Jauho, Technical University of Denmark, com Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes.
- Laurens Molenkamp, Universität Würzburg, Alemanha, com Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes.
- Daniel Loss, Universität Basel, Suíça, com Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes.
- Peter F. Stadler, Universidade de Viena, Áustria, com Prof. Dr. José Fernando Fontanari.
- Claus Otto Wilker, Digital Life Laboratory - California Institute of Technology, Prof. Dr. José Fernando Fontanari.
- Domingos Alves, Faculdades CoC, Ribeirão Preto, Prof. Dr. José Fernando Fontanari.
- John W. Wilkins, Ohio State University, EUA, com Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira.
- Daniel L. Cox, Universidade da Califórnia em Davis, EUA, com Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira.
- William Bialek e Prof. R. de Ruyter Van Steveninck, NEC Research Institute, Princeton, EUA, com Prof. Dr. Roland Köberle.
- Dr. Michael Dickinson, University of California – Berkeley com Prof. Dr. Roland Köberle.
- Makoto Yoshida, UNESP, Rio Claro, com Prof. Dr. Valter Luiz Libero e com Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira.
- Raphael Tsu., University of North Carolina at Charlotte, EUA, com Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Jr.
- Prof. Dr. Uibraci Pereira da Costa Neves, Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto, USP, com Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody.
- Prof. Dr. Nazareno Getter Ferreira de Medeiros, Departamento de Física, Universidade Estadual de Feira de Santana – Bahia.
- Profa. Dra. Wanda Conceição de Oliveira, Universidade Federal Fluminense, Niterói, RJ, com Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira.
- Prof. Dr. Roberto Bechara Muniz, Universidade Federal Fluminense, Niterói, RJ, com Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira.
- Prof. Dr. José D'Albuquerque e Castro, Universidade Federal do Rio de Janeiro, com Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira.
- Prof. Dr. Paulo Afonso Faria da Veiga, Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, USP, com Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior

Pesquisadores Visitantes

- Prof. Dr. Edvaldo Nogueira Júnior, Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, Salvador, BA, de 01/02/2002 a 31/01/2003 – Prof. José Fernando Fontanari.
- Dr. Willem Hordijk, Instituto de Estatística, Universidade de Viena, Áustria, 01/06 a 30/11/2002 – Prof. José Fernando Fontanari.
- Prof. Dr. Ulrich Hans Ewald Hansmann, Michigan Technological University, 08/08/2002 – Prof. José Fernando Fontanari.
- Prof. Dr. Francisco George Brady Moreira, Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE, 03 a 07/09/2002 – Prof. José Fernando Fontanari.
- Prof. Dr. José Roberto Drugowich de Felício, Departamento de Física Matemática, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, USP, 25/10/2002 – Prof. José Fernando Fontanari.
- Prof. Dr. Peter Florian Stadler, Universidade de Leipzig, Alemanha, 10 a 23/11/2002 – Prof. José Fernando Fontanari.
- Delida Ines Caridi, CNEA, Argentina, 11 a 29/11/2002 – Prof. José Fernando Fontanari.
- Prof. Dr. Clisteni s Ponce Constantinidis, UFES, Vitória, ES, 12 a 24/12/2002 – Prof. José Fernando Fontanari.
- Dr. Ivan S. Oliveira, Ministério da Ciência e Tecnologia, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, RJ, 12/04/2002, para ministrar colóquio no IFSC – Prof. Lidério C. Ioriatti Júnior.
- Prof. Dr. Alain Michalowicz, Groupe de Physique des Milieux Denses (GPM) – Faculte de Sciences et Technologie – Université Paris XII, Val del Marne, France, 26/04/2002, para ministrar colóquio no IFSC – Prof. Lidério C. Ioriatti Júnior.
- Profa. Dra. Alinka Lépine-Szily, Instituto de Física da USP, São Paulo, SP, 03/05/2002, para ministrar colóquio no IFSC – Prof. Lidério C. Ioriatti Júnior.
- Prof. Dr. Antonio Fernando R. Toledo Piza, Instituto de Física da USP, São Paulo, SP, 24/05/2002, para ministrar colóquio no IFSC – Prof. Lidério C. Ioriatti Júnior.
- Prof. Dr. Celso Grebogi, Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, SP, 14/06/2002 – para ministrar colóquio no IFSC – Prof. Lidério C. Ioriatti Júnior e Prof. Roland Köberle.
- Prof. Dr. Adalberto Fazzio, Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, SP, 21/06/2002, para ministrar colóquio no IFSC – Prof. Lidério C. Ioriatti Júnior.
- Prof. Dr. Carlos Henrique de Brito Cruz, Pró-Reitor da UNICAMP, Campinas, SP, 23/08/2002, para ministrar colóquio no IFSC – Prof. Lidério C. Ioriatti Júnior.
- Prof. Dr. Nestor Felipe Caticha Alfonso, Instituto de Física da USP, São Paulo, SP, 30/08/2002, para ministrar colóquio no IFSC – Prof. Lidério C. Ioriatti Júnior.
- Prof. Dr. Oscar Nassif de Mesquita, Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, 13/09/2002, para ministrar colóquio no IFSC – Prof. Lidério C. Ioriatti Júnior.
- Prof. Dr. Daniel Ugarte, Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, Campinas, SP, 20/09/2002, para ministrar colóquio no IFSC – Prof. Lidério C. Ioriatti Júnior.
- Prof. Dr. Sylvio Roberto Accioly Canuto, Instituto de Física da USP, São Paulo, SP, 27/09/2002, para ministrar colóquio no IFSC – Prof. Lidério C. Ioriatti Júnior.
- Prof. Dr. Oswaldo Baffa Filho, Departamento de Física Matemática, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, USP, Ribeirão Preto, SP, 11/10/2002, para ministrar colóquio no IFSC – Prof. Lidério C. Ioriatti Júnior.
- Prof. Dr. Elson Longo da Silva, Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP, 25/10/2002, para ministrar colóquio no IFSC – Prof. Lidério C. Ioriatti Júnior.
- Dra. Silvia Ramos, European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, França, 31/10/2002, para ministrar colóquio no IFSC – Prof. Lidério C. Ioriatti Júnior.
- Prof. Dr. Paulo Afonso Faria da Veiga e Prof. Dr. Michael O'Carroll, Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, USP, com Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior
- Prof. Dr. Jean-Jacques Soares de Groote - Faculdades CoC, Ribeirão Preto, com Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior

Linhas de Pesquisa

Título 1: "Capacitação Docente no Ensino Superior"

Pessoal Envolvido:

- Profa. Dra. Aguida Celina de Mello Barreiro (Professora Doutora) - Docente

Objetivos: Analisar reflexivamente a docência no ensino universitário e apresentar propostas para a formação pedagógica inicial e continuada dos profissionais do ensino superior na área das ciências exatas.

Resultados: Apresentação de trabalhos em congressos e publicações.

Título 2: "Ensino de Física."

Pessoal Envolvido:

- Profa. Dra. Aguida Celina de Mello Barreiro (Professora Doutora) - Docente

Objetivos: Investigar questões relacionadas ao Ensino de Física na vertente da preparação pedagógica.

Resultados: Apresentação de trabalhos em congressos e publicações.

Título 3: "Spin-dependent quantum shot noise"

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes (Professor Doutor) – Docente
- Fabrício Macedo de Souza (Aluno de Doutorado)
- Prof. Dr. Antti-Pekka Jauho.

Agência Financiadora: FAPESP (12/2000 a 11/2004)

Objetivos: Determinar "shot noise" em sistema fora do equilíbrio via o formalismo de Keldysh. Consideramos geometrias com tunelamento ressonante com interação de Coulomb e espalhamento com inversão de spin no nível ressonante (e.g., junção ferromagneto/ponto-quântico/ferromagneto).

Resultados: Em junções FM/dot/FM, shot noise e corrente apresentam comportamentos contrastantes em função da taxa de inversão de spin. A magnetorresistência túnel do sistema exibe características interessantes assim com o regime de bloqueio comombiano (corrente e ruído). Sumário de resultados preliminares: F. M. Souza, J. C. Egues, e A.P. Jauho, cond-mat/0209263 (To appear in the Proceedings of the ICPS 26).

Título 4: "Spin-dependent physics in Mn-based systems."

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes (Professor Doutor) - docente.
- Henrique Jota de Paula Freire (aluno de Doutorado)
- Prof. Dr. Nitin Samarth
- Dr. Klaus Capelle

Agência Financiadora: FAPESP (07/99 – 09/2003)

Objetivos: Investigar a estrutura eletrônica de poços quânticos magnéticos rasos (e superredes) utilizando o método do funcional da densidade na aproximação de densidade de spin local (DFT/LSDA). Avaliar a qualidade de diversos funcionais da densidade em sistemas semicondutores do grupo II-IV.

Resultados: Efeitos de troca e correlação (incluídos em nossas simulações via DFT/LSDA) tem se revelado extremamente importante na descrição correta dos estados eletrônicos em poços quânticos magnéticos rasos. Veja: H. J. P. Freire e J. C. Egues, cond-mat/0209566, Proceedings of the 2nd International Conference on Physics and Application of Spin Related Phenomena in Semiconductors (PASPS), Würzburg, July 2002 (to appear in the Journal of Superconductivity) e H. J. P. Freire e J. C. Egues, Braz. J. Phys 32(2A), 327 (2002).

Título 5: "Inferência Ancestral em Evolução Molecular"

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. José Fernando Fontanari (Professor Associado) – Docente
- Alexandre Colato (Aluno Doutorado)

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: Determinar através de técnicas de mecânica estatística e processos estocásticos os parâmetros de controle de modelos de evolução molecular que geram uma dada série de eventos observáveis.

Resultados: Adequação do Método de Monte-Carlo com cadeias de Markov ocultas para investigar esse problema.

Título 6: “Métodos de Monte Carlo para inferência ancestral em evolução molecular”**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. José Fernando Fontanari (Professor Associado) – Docente
- Leonardo Paulo Maia (Aluno Doutorado)

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: A maioria das aplicações da teoria de processos estocásticos à dinâmica de populações têm se concentrado na caracterização do comportamento dinâmico como função dos parâmetros de controle do modelo. Nosso objetivo é abordar o problema inverso, a saber, dada a observação de um processo que acreditamos ter sido produzido por um modelo estocástico conhecido, como podemos determinar os valores mais prováveis dos parâmetros de controle do modelo que explicam os dados observados? Um dos aspectos que tornam esse problema inverso mal definido é que, em geral, temos acesso apenas a uma pequena fração dos dados que descrevem o processo. Por exemplo, no problema que vamos considerar -inferência de filogenias moleculares- temos conhecimento apenas das espécies sobreviventes no presente, os dados sobre as espécies extintas não são diretamente observáveis. O tratamento dessa informação incompleta requer a integração da distribuição de probabilidade para um dado modelo com respeito aos dados desconhecidos, o que é factível somente através de métodos de integração estocásticos como o de Monte Carlo. Pretendemos ainda explorar o uso do método dos aglomerados superparamagnéticos, originário da física de materiais magnéticos granulares desordenados, para inferir relações de ancestralidade entre indivíduos: a natureza hierárquica desse método parece-nos muito apropriada para a classificação dos indivíduos em famílias (aglomerados).

Resultados: Em andamento.

Título 7: “Dinâmica e genealogia de modelos de genética de populações com recombinação”**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. José Fernando Fontanari (Professor Associado) – Docente
- Daniela Favarão Botelho (Aluna Mestrado)

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: Estudar de forma sistemática e quantitativa como os mecanismos de recombinação afetam a velocidade da catraca de Müller em situações em que o efeito das mutações é sinérgico, ou seja, o efeito deletério de uma nova mutação em um indivíduo é simplificado pelas mutações anteriores. Paralelamente, investigaremos como a recombinação afeta a topologia da árvore genealógica de uma amostra de indivíduos na população utilizando a simulação da evolução temporal de toda a população.

Resultados: Espera-se poder comparar os resultados dessa abordagem direta com os da sofisticada teoria da coalescente com a recombinação.

Título 8: “Evolução dinâmica e filogenia em relevos rugosos ”**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. José Fernando Fontanari (Professor Associado) – Docente
- Paulo Roberto de Araújo Campos (Pós-Doutorando)

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: Extensão do aprendizado teórico em genética populacional para sistemas mais realísticos. Em particular, pretende-se estudar os relevos rugosos de adaptação, que são relevos verificados em sistemas reais, tais como os relevos de RNA e proteínas. Os avanços recentes adquiridos na área de Biologia Molecular Estrutural como também o advento de diversos modelos teóricos têm permitido abordar o problema da biologia evolucionária de forma bem mais precisa. Na primeira parte do projeto, objetivamos o estudo do comportamento dinâmico evolutivo de uma população, como também entender as propriedades topológicas do relevo de adaptação com neutralidade, e seus efeitos no processo de otimização evolucionária.

Resultados: Em andamento.

Título 9: “Origem e evolução de sistemas auto-catalíticos”**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. José Fernando Fontanari (Professor Associado) – Docente
- Alexandre da Silva Rosas (Pós-Doutorando)

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: Pretendemos estudar a formação de sistemas auto-catalíticos utilizando o modelo de Axelrod de influência social, empregado na análise da formação de domínios culturais. A interação não-covalente entre as moléculas, responsável pelo reconhecimento (complementaridade) molecular, será modelada utilizando o conceito de espaço de formas introduzido no estudo do sistema imunológico.

Resultados: Esperamos que a introdução da plasticidade nessas interações favoreça o surgimento de domínios estáveis de moléculas cooperativas permitindo a superação dos limiares de concentração. Foram submetidos à publicação os seguintes artigos: “Evolution of protein synthesis in a lattice of replicators”, Phys. Rev. Lett. e “Spatial dynamics and the evolution of enzyme production”, separata submetida à publicação na edição teórica do periódico “Origins of Life and Evolution of the Biosphere”, a convite do Professor Eörs Szathmáry. Outros projetos iniciados em colaboração com o Dr. Alexandre Rosas, no período, que assumiu uma posição de pós-doutorando na Universidade da Califórnia, em San Diego, EUA, também terão continuidade.

Título 10: “Evolução de integradores de informação pré-bióticos através de algoritmos genéticos”**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. José Fernando Fontanari (Professor Associado) – Docente
- Willem Hordijk (Pós-Doutorando)
- Peter Florian Stadler (Universidade de Viena, Áustria)

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: O modelo de quase-espécies de Eigen, baseado na modelagem Darwiniana da evolução de populações de moléculas replicadoras, mostrou que a fidelidade de replicação das moléculas limita o tamanho do genoma que pode ser mantido por forças seletivas. Como solução desse problema (crise da informação ou catástrofe do limiar de erro de replicação) foi proposto o hiperciclo como modelo de integração da informação, no qual um número arbitrário de replicadores permanecem unidos através de um laço catalítico. Embora muitas questões referentes à estabilidade dos hiperciclos frente a uma classe especial de mutantes (parasitas) tenham sido levantadas, pondo em dúvida sua eficácia como integrador de informação, uma questão fundamental, que é o tema central do projeto, refere-se ao esclarecimento do modo como tais sistemas complexos surgiram espontaneamente sob a ação da seleção natural. Especificamente, vamos utilizar um Algoritmo Genético (AG) para explorar o espaço de reações de um conjunto de moléculas replicadoras, tendo como alvo a conservação (neste contexto, leia-se replicação fidedigna) de uma certa informação dada a priori. Esperamos que, além dos hiperciclos, o AG encontre soluções alternativas ao problema da crise da informação em evolução pré-biótica.

Resultados: Com a interação do Dr. Willem Hordijk com os alunos de doutorado do grupo, houve um estímulo muito eficiente no aperfeiçoamento de suas habilidades de programação. Como resultado, a duração de programas baseados em algoritmos genéticos foi reduzida em um fator 5, em média. Foram terminados dois artigos, “Catalytic reaction sets, decay, and the preservation of information” e “Measures of barriers trees”, que foram submetidos à publicação.

Título 11: “Origem da evolução de sistemas auto-catalíticos”**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. José Fernando Fontanari (Professor Associado) – Docente
- Giovano de Oliveira Cardozo (aluno Doutorado)

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: Um tema dominante em evolução pré-biótica é a busca de uma explicação “Darwiniana” para a existência de cooperação entre moléculas auto-replicantes, manifestada na natureza através da simbiose sinérgica e catálise.

De fato, tanto o surgimento de um metabolismo rudimentar, como o de um sistema capaz de armazenar e transmitir quantidades moderadas de informação requerem um trabalho cooperativo que, num estágio inicial, pode ser pensado como um comportamento altruístico. Em geral, a estabilização de grupos altruístas só é possível se a concentração desses indivíduos superar um certo valor não-nulo, de modo que o altruísmo não pode surgir como um comportamento mutante invasor em um meio de não-altruístas. Pretendemos estudar a formação de sistemas auto-catalíticos utilizando o modelo de Axelrod de influência social, empregado na análise da formação de domínios culturais. A interação não-covalente entre as moléculas, responsável pelo reconhecimento (complementaridade) molecular, será modelada utilizando o conceito de espaço de formas introduzido no estudo do sistema imunológico. Esperamos que a introdução de plasticidade nessas interações favoreça o surgimento de domínios estáveis de moléculas cooperativas permitindo a superação dos limiares de concentração.

Resultados: Em andamento.

Título 12: "Ecossistemas de replicadores"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. José Fernando Fontanari (Professor Associado) – Docente
- Danielle Oliveira Costa Santos (aluna Mestrado)
- Viviane Moraes de Oliveira (Pós-Doutoranda)

Agência Financiadora: CAPES

Objetivos: As propriedades de equilíbrio de ecossistemas complexos formados por um número muito grande de espécies podem ser estudadas através de técnicas de mecânica estatística de sistemas desordenados, com a hipótese de que as interações entre espécies sejam simétricas. Em particular, nessa formulação a fração de espécies de um dado tipo é representada por uma variável de spin contínua com valores restritos ao eixo real positivo. O caso em que as interações entre espécies são fixas (dito "desordem quenched") tem sido extensamente estudado em nosso grupo. Neste projeto pretendemos tratar analiticamente a situação mais realística em que as interações possuem uma dinâmica própria, com relaxação mais lenta que a dos spins, através do método de réplicas "generalizado" (isto é, o número de réplicas é interpretado como a razão entre as temperaturas associadas aos spins e às interações) introduzido por Penney, Coolen & Sherrington (J. Phys. A, vol. 26, pp. 3681, 1993). O estudo analítico será complementado por simulações numéricas que, além da verificação independente dos resultados da teoria de réplicas, servirão para testar a estabilidade do equilíbrio frente às variações na intensidade das interações. A formulação da teoria de replicadores é bastante genérica e nossa intenção, a médio prazo, é particularizar o formalismo para o caso em que as entidades replicadoras são moléculas (e.g. RNA) introduzindo assim uma nova técnica analítica para o estudo da evolução molecular pré-biótica.

Resultados: Em andamento.

Título 13: "Propriedades Multifractais de Estruturas Biológicas"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. José Fernando Fontanari (Professor Associado) – Docente
- Prof. Dr. Edvaldo Nogueira Júnior (Professor Visitante)
- Peter Florian Stadler (Universidade de Viena, Áustria)

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: O estudo das propriedades multifractais de estruturas complexas invariantes localmente por transformações de escala visa a caracterização ou identificação dessas estruturas através de seus espectros de dimensões de Rényi D_q ou, equivalentemente, de seus espectros de singularidades $f(\alpha)$. Neste projeto vamos proceder à análise multifractal de duas representações abstratas distintas no espaço de fase de sistemas complexos, a saber, o perfil de energia e a estrutura da árvore que conecta mínimos (ou espécies correntes) através de pontos de sela (ou ancestrais). Essas representações serão obtidas tanto para problemas de interesse biológico (estrutura secundária de RNAs e árvores filogenéticas) como para modelos clássicos de mecânica estatística de sistemas desordenados (vidros de spin com interações de spins).

Resultados: Em andamento.

Título 14: "Interferência entre modos vibracionais e excitações eletrônicas em super-redes semicondutoras dopadas"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Jr. (Professor Associado) – Docente
- Leonardo Kleber Castelano (Aluno Mestrado)

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: Investigação teórica de interferências entre modos vibracionais e excitações eletrônicas em super-redes semicondutoras obtidas através de modulação de carga espacial.

Resultados: Os resultados fazem parte da dissertação de Mestrado do aluno Leonardo Kleber Castelano.

Título 15: "Método hiper-esférico aplicado ao estudo do íon D^- na presença de um campo magnético"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Jr. (Professor Associado) – Docente
- Jean-Jacques Soares de Groote (UNESP)
- Antonio Sérgio dos Santos (aluno de Doutorado)

Agência Financiadora: CNPq e CAPES

Objetivos: O método adiabático hiper-esférico (HAA) é usado para determinar-se as energias e as funções de onda dos estados ligados de um íon negativamente carregado (D^-) na presença de um campo magnético em semicondutores.

Resultados: Conseguimos calcular a energia do estado fundamental. Os resultados estão em excelente acordo com os dados obtidos através de métodos variacionais e estão relatados na tese já defendida do aluno Antonio Sérgio dos Santos.

Título 16: "Teoria do Funcional da Densidade"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira (Professor Titular) – Docente
- Dr. Klaus W. Capelle (Pesquisador visitante IQSC/USP)
- Marcelo Ferreira da Silva (Aluno Doutorado)
- Neemias Alves de Lima (Aluno Doutorado)

Agência Financiadora: FAPESP, CNPq, CAPES

Objetivos: Calcular a estrutura eletrônica de materiais antiferromagnéticos itinerantes.

Resultados: Geramos nova formulação do Funcional da Densidade, especialmente desenvolvida para levar em consideração a correlação não-local nesses sistemas. Fizemos aplicação dessa formulação ao modelo de Hubbard. Os alunos Marcelo Ferreira de Souza e Neemias Alves de Lima, defenderam suas teses de doutorado em 2002.

Título 17: "Sistemas Eletrônicos Fortemente Correlacionados"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira (Professor Titular) – Docente
- Cintia Aguiar (Sociedade Ligeira de Educação/Faculdades UNIVEST)
- Vivaldo Leiria Campo Júnior (Aluno Doutorado)

Agência Financiadora: FAPESP, CAPES, FINEP.

Objetivos: Estudar as propriedades físicas de sistemas fortemente correlacionados.

Resultados: Conseguimos calcular a condutividade AC de uma nanoestrutura. Estamos estendendo esses resultados para temperaturas diferentes de zero e situações de não-equilíbrio.

Título 18: "Tamanho da nuvem Kondo"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira Nunes (Professor Titular) – Docente
- Kerson Rocha Júnior (Aluno Doutorado)

Agência Financiadora: FAPESP, CNPq.

Objetivos: Calcular propriedades físicas medidas para uma prova metálica a uma distância R de uma impureza magnética.

Resultados: Desenvolvemos um código computacional que calcula as propriedades de duas impurezas magnéticas em função da distância entre elas.

Título 19: "Influência do efeito Kondo na condutância de contactos pontuais em superfícies metálicas"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira (Professor Titular) – Docente
- Antonio Carlos Ferreira Seridônio (Aluno Mestrado)

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: Determinar a corrente medida por uma ponta de STM próxima de uma impureza magnética em metal.

Resultados: Foi calculada a corrente de tunelamento em função da distância entre impureza e ponta de prova. O aluno defendeu sua dissertação de Mestrado em abril de 2002.

Título 20: "Novos métodos para cálculo de propriedades de impurezas em metais"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira (Professor Titular) – Docente
- Antonio Carlos Ferreira Seridônio (Aluno Doutorado)

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: A determinação de propriedades termodinâmicas de sistemas metálicos com impurezas magnéticas apresentou dificuldades de convergência a baixas temperaturas quando efetuada por teoria de perturbação. Resultados mais apurados começaram a surgir com abordagens não perturbativas, através de propostas como o ansatz de Bethe, a expansão 1/N, Grupo de Renormalização Numérico (NGR) e Matriz Densidade do Grupo de Renormalização (DMRG). Tais métodos tiveram sucesso ao calcular propriedades físicas, na faixa de baixas energias, de sistemas metálicos com uma única impureza. Cálculos precisos para sistemas com um número elevado de graus de liberdade, como os que possuem duas ou mais impurezas, ainda não são possíveis. Nossa proposta é desenvolver um método sistemático capaz de tratar sistemas metálicos com duas ou mais impurezas. Isso poderia ser feito através da junção do NRG com o DMRG. O primeiro, poderá ser combinado com o segundo, especificamente criado para abordar sistemas com muitos graus de liberdade. A aplicação preliminar da proposta, será sobre o Hamiltoniano de Anderson de uma impureza. O passo seguinte será o estudo de um problema ainda não resolvido satisfatoriamente: a suscetibilidade magnética no caso do Hamiltoniano de Anderson de duas impurezas. Havendo tempo, desenvolveremos também estudos sobre frustrações para os modelos de Anderson e Kondo de três impurezas.

Resultados: Em andamento.

Título 21: "Density-Functional approach to the interplay between antiferromagnetism and superconductivity"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira (Professor Titular) – Docente
- Jorge Quintanilla Tizon (Pós-Doutorando)

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: The coexistence of antiferromagnetism and superconductivity is a conspicuous feature in the phase diagram of the high T_c oxides. A number of models and more realistic studies of these materials have given attention to this feature.

Here we propose an alternative approach, based on Density-Functional Theory (DFT). Three considerations dictate our choice: (i) at the formal level, DFT for superconductors and for antiferromagnets is well established; (ii) the (single-particle) Kohn-Sham equations associated with this formalism are much easier to analyze than *ab initio* formulations or model Hamiltonians; (iii) in spite of their mathematical simplicity, the Kohn-Sham equations are formally equivalent to the many-body problem they represent. DFT thus provides an advantage viewpoint, giving access to the intricate relation between the two orderings. In particular, DFT is convenient because the Cooper pair density and the staggered density, the order parameters for superconductivity and antiferromagnetism, respectively, are among its fundamental variables.

Resultados: Um trabalho foi submetido, e aceito para publicação com comentários no Physical Review Letters.

Título 22: "Algoritmos de otimização"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody (Professor Associado) – Docente
- Paulo Alexandre de Castro (Aluno Mestrado)

Agência Financiadora: CNPq

Objetivos: Estudar algoritmos de otimização em sistemas físicos utilizando o modelo de Kak-Sneppen.

Resultados: O aluno defendeu sua dissertação de Mestrado em abril de 2002.

Título 23: "Algoritmos de otimização aplicados em sistemas físicos e biológicos"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody (Professor Associado) – Docente
- Paulo Alexandre de Castro (Aluno Doutorado)

Agência Financiadora: CNPq

Objetivos: Estudar algoritmos de otimização em sistemas físicos utilizando o modelo de Bak-Sneppen. Simular esses modelos em redes complexas como a de Barabási-Albert. Determinar os coeficientes de clustering, assortatividade e diâmetro.

Resultados: Em andamento.

Título 24: "Modelos Evolucionários de Envelhecimento"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody (Professor Associado) – Docente
- Matheus Pereira Lobo (Aluno Mestrado)

Agência Financiadora: CAPES

Objetivos: Incorporar ao modelo de Heumann-Hözel os parâmetros externos: idade mínima e máxima de reprodução, frequência e intensidade de mutações e fertilidade. Estudar numericamente essa nova dinâmica analisando a existência ou não de senescência catastrófica e lei de Gompertz.

Resultados: Em andamento.

Título 25: "Processamento de Informação no Duto Óptico da Mosca"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. Roland Köberle (Professor Titular) – Docente
- Prof. Dr. Jan Frans Willem Slaets (Professor Titular) – Docente
- Lírio Onofre Baptista de Almeida (Técnico)
- Ivanilda Helena Zucolotto Stéfani (Técnica)

Agência Financiadora: FAPESP, RUSP

Objetivos: Construção de um laboratório de neurofisiologia para registrar respostas de neurônios da Placa Lobular de mosca, provocados por estímulos visuais controlados. Análise teórica do processamento de informação do duto óptico da mosca. Estudo das estratégias quimiotáticas usadas pela bactéria *E. Coli*.

Resultados: Obtenção de sinais do neurônio H1 da placa lobular da mosca *Chrysomya Megacephala*. Análise das funções de correlação do trem de pulsos gerado pelo neurônio H1. Análise da informação transmitida pelo neurônio H1 sobre o estímulo visual.

Título 26: "Calibrando a posição dos omatídeos"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. Roland Köberle (Professor Titular) – Docente
- Nelson Mesquita Fernandes (aluno Iniciação Científica)

Agência Financiadora: CNPq (PIBIC), FAPESP

Objetivos: 1) Estudar processamento de sinais, em particular Simplifying Theory. Isto requer basicamente Álgebra Linear e Transformada de Fourier e Cálculo; 2) Aplicar a teoria anterior ao caso específico em pauta; 3) Desenhar o estímulo apropriado a ser visto pela mosca; 4) Programar o hardware para gerar este estímulo no monitor; 5) Fazer a experiência de calibração em várias moscas; 6) Analisar os dados, à luz da teoria desenvolvida no item 2.

Resultados: Em andamento.

Título 27: "O código neural da Mosca"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. Roland Köberle (Professor Titular) – Docente
- Damian Ernesto Oliva (aluno Doutorado)

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: A motivação para o presente projeto é elucidar os algoritmos usados no processamento de informação no duto óptico da mosca *Chrysomya M.* Em contraste com um sistema físico, um biológico tem que se adaptar a inúmeras variações no meio ambiente para sobreviver. Usando tanto técnicas teóricas, como experimentais, pretendemos - elucidar pelo menos parcialmente - o código neural usado pela mosca para esta finalidade.

Resultados: Em andamento 2002.

Título 28: "Explorando o código neural da Mosca"**Pessoal Envolvido:**

- Prof. Dr. Roland Köberle (Professor Titular) – Docente
- Deusedit Lineu Spavieri Júnior (aluno Mestrado)

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: O nosso objetivo é estudar a transmissão de informação no duto óptico da mosca.

Para isto o candidato deve:

- 1 - completar sua formação de engenheiro elétrico com disciplinas obrigatórias na pós-graduação de Física Básica;
- 2 - se familiarizar com as técnicas experimentais existentes no laboratório e planejar/executar novas modalidades. Estamos, em particular, interessados em projetar um sistema, que permita a apresentação de estímulos mais realísticos a mosca;
- 3 - executar a análise dos dados a serem gerados pelos experimentos do laboratório e executar/planejar novos experimentos.

Resultados: Em andamento 2002.

Título 29: “Teoria do Campo Unificado Não-simétrico. Parte I”

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Silvestre Ragusa (Professor Associado) – Docente Aposentado

Resultados: Estabelecimento de uma teoria de unificação da gravitação e eletromagnetismo. Publicação: S. Ragusa. Nonsymmetric unified field theory. Publicado no Physical Review D 62, 024026 (2000).

Título 30: “Teoria do Campo Unificado Não-simétrico. Parte II – Aspectos Fenomenológicos”

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Silvestre Ragusa (Professor Associado) – Docente Aposentado

Resultados: Obtenção da equação de movimento de uma carga e análise do conteúdo de partículas na aproximação linear. Publicação: Trabalho publicado no Physical Review D 63, 084019 (2001).

Título 31: “Teoria do Campo Unificado III. Soluções para uma Carga Puntiforme”

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Silvestre Ragusa (Professor Associado) – Docente Aposentado

Resultados: Solução das equações para o caso de uma carga puntiforme e obtenção da equação de movimento de uma carga teste. Trabalho publicado no Physical Review D 64, 067501 (2001). Solução das equações para o caso de uma carga puntiforme e obtenção da equação de movimento de uma carga teste.

Título 32: “Teoria Não Simétrica da Gravitação”

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Silvestre Ragusa (Professor Associado) – Docente Aposentado

Objetivos: Seguindo os trabalhos constantes no relatório anterior, estamos no processo de obtenção das leis de conservação na teoria não simétrica da gravitação.

Título 33: “Radiação Eletromagnética e Gravitacional”

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Silvestre Ragusa (Professor Associado) – Docente Aposentado
- Matheus Jatkoske Lazo (Aluno Mestrado)

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: a) Cálculo da emissão de energia e momentum angular eletromagnéticos; b) gravitacionais, através do cálculo da taxa de trabalho e torque das forças internas do sistema contra as próprias forças eletromagnéticas e campo gravitacional, respectivamente.

Resultados: Execução de cálculos e redação dos respectivos trabalhos. O aluno defendeu a dissertação de Mestrado em 2002.

Título 34: “Deflexão gravitacional de partículas massivas e não-massivas em Segunda ordem na constante de Newton”

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Silvestre Ragusa (Professor Associado) – Docente Aposentado
- Antonio Accioly (IFT/UNESP)
- H. Blas (IFT/UNESP)
- H. Mukai (Universidade Estadual de Maringá)

Objetivos: Obter a deflexão de partículas massivas e não-massivas pelo sol.

Resultados: Três trabalhos foram submetidos à publicação.

Título 35: “Teoria Unificada da Gravitação, Eletromagnetismo e Campo de Young-Mills”

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Silvestre Ragusa (Professor Associado) – Docente Aposentado

Objetivos: Generalização da geometria riemanniana com métrica não simétrica com cada componente sendo uma matriz 2×2 , a fim de acomodar os campos da gravitação, eletromagnetismo e de Young-Mills.

Resultados: Trabalho publicado no Chemical and Quantum Gravity 19, 5969 (2002).

Título 36: “Teoria da gravitação não-simétrica: radiação de energia gravitacional e tensor momentum-energia de um fluido”

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Silvestre Ragusa (Professor Associado) – Docente Aposentado
- Lucas Chibebe Céleri (Aluno Mestrado)

Agência Financiadora: CNPq

Objetivos: 1) Análise detalhada do caráter positivo definido da energia gravitacional.

2) Estabelecimento da expressão do tensor momentum-energia-esforços de um fluido perfeito.

Resultados: Dissertação de Mestrado em andamento.

Título 37: “Modelos de Impurezas Isoladas em Metais, utilizando-se a Técnica do Grupo de Renormalização Numérico”

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Valter Luiz Libero (Professor Doutor) – Docente
- Luis Roberto Ramos (Aluno Doutorado)
- João Vítor B. Ferreira (Pós-Doutorando)

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: Cálculos de propriedades termodinâmicas como calor específico, entropia e suscetibilidade de modelos contendo impurezas magnéticas. Estamos também calculando a densidade espectral de modelos de duas impurezas acopladas.

Resultados: O aluno Luis Roberto Ramos defendeu sua tese de Doutorado no final de 2002.

Título 38: “Propriedades termodinâmicas e dinâmicas do modelo de Anderson de dois canais”

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Valter Luiz Libero (Professor Doutor) – Docente
- João Vítor Batista Ferreira (Pós-Doutorando)

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: Aprimorar o cálculo da susceptibilidade magnética e do calor específico, determinar a razão de Wilson e calcular pela primeira vez a densidade espectral do modelo de Anderson de dois canais, através do Grupo de Renormalização Numérico (GRN).

Resultados: Obtivemos as curvas de calor específico e as de susceptibilidade magnética utilizando a técnica do Grupo de Renormalização Numérica em duas etapas.

Título 39: “Modelo Kondo de 2 canais com anisotropia de troca e de canais”

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Valter Luiz Libero (Professor Doutor) – Docente
- Amilton de Matos Teixeira (aluno Doutorando)

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: Estudaremos o modelo Kondo de dois canais, isto é, um modelo em que uma impureza magnética interage com um banho fermiônico, abrindo dois canais de condução no mesmo (dois conjuntos de números quânticos distintos que descrevem os elétrons de condução). Utilizaremos a técnica do grupo de renormalização numérico para obter propriedades termodinâmicas, como calor específico, entropia ou susceptibilidade magnética. Pretendemos tratar o problema em sua generalidade, incluindo a possibilidade de anisotropia de canais, bem como anisotropia de troca na interação banda impureza. Tendo, então, perdido muitas das simetrias comumente mantidas para esse problema, será imprescindível para a diagonalização do modelo que usemos grandes parâmetros de discretização da banda de condução, o que resulta em oscilações indesejáveis das propriedades termodinâmicas quando expressas em função da temperatura. Para contornar essa dificuldade será utilizada uma discretização generalizada da banda de condução, que diferentemente daquela original de Wilson, utiliza dois parâmetros. Isso tem se mostrado essencial em outros modelos já abordados.

Resultados: Em andamento.

Título 40: "Aplicação da Teoria do Funcional da Densidade no Modelo de Heisenberg"

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Valter Luiz Libero (Professor Doutor) – Docente
- Klaus Werner Capelle – Jovem Pesquisador IQSC

Agência Financiadora: FAPESP.

Objetivos: Determinação da energia do estado fundamental do modelo de Heisenberg através da implementação da DFT.

Resultados: Trabalho enviado à publicação.

Publicações

Artigo Publicado em Periódico – Internacional

1. J. C. EGUES, G. BURKARD, e D. LOSS, Rashba spin-orbit interaction and shot noise for spin-polarized and entangled electrons, *Physical Review Letters*, College Park, vol. 89, p. 176401-1-176401-4, Oct. 2002. Fator de impacto: 06.462.
2. MORTENSEN, N A; EGUES, J C. Universal spin-polarization fluctuations in one-dimensional wires with magnetic impurities. *Phys. Rev. B*, College Park, vol. 66, n. 15, p. 153306/1-153306/4, Oct. 2002. Fator de impacto: 03.065
3. SOUZA, F M; EGUES, J C. Screening ineffectiveness and THz emission at bare LO phonon frequencies. *Phys. Rev. B*, College Park, vol. 66, n. 6, p. 060301-1-060301-4, Aug. 2002. Fator de impacto: 03.065
4. FERREIRA, C P; FONTANARI, J F. Nonequilibrium phase transitions in a model for the origin of life. *Phys. Rev. E*, College Park, vol. 65, n. 2, p. 021902-021902-10, Feb. 2002. Fator de impacto: 02.142
5. FONTANARI, J F; STADLER, P F. Fractal geometry of spin-glass models. *J. Phys. A*, Bristol, vol. 35, n. 7, p. 1509-1516, Feb. 2002. Fator de impacto: 01.365
6. OLIVEIRA, V M; FONTANARI, J F. Complementarity and diversity in a soluble model ecosystem. *Phys. Rev. Lett.*, College Park, vol. 89, n. 14, p. 148101-1-148101-4, Sep. 2002. Fator de impacto: 06.462
7. ROSAS, A; FERREIRA, C P; FONTANARI, J F. Evolution of protein synthesis in a lattice model of replicators. *Phys. Rev. Lett.*, College Park, vol. 89, n. 18, p. 188101/1-188101/4, Oct. 2002. Fator de impacto: 06.462
8. ROSAS, A; NOGUEIRA, E; FONTANARI, J F. Multifractal analysis of DNA walks and trails. *Phys. Rev. E*, College Park, vol. 66, n. 6, p. 061906-1-061906-6, Dec. 2002. Fator de impacto: 02.142
9. WILKE, C O; CAMPOS, P R A; FONTANARI, J F. Genealogical process on a correlated fitness landscape. *J. Exp. Zool.*, New York, vol. 294, n. 3, p. 274-284, 2002. Fator de impacto: 01.474
10. SANTOS, A S; DE GROOTE, J J; IORIATTI JR, L C. The non-adiabatic hyperspherical approach to the two-dimensional 'D POT.-' ion in the presence of a magnetic field. *J. Phys.: Condens. Matter*, Bristol, vol. 14, n. 27, p. 6841-6853, Jul. 2002. Fator de impacto: 01.608
11. VEIGA, P A F; IORIATTI JR, L C; O'CARROLL, M. Energy-momentum spectrum of some two-particle lattice Schrodinger Hamiltonians. *Phys. Rev. E*, College Park, vol. 66, p. 016130-1-016130-9, Jul. 2002. Fator de impacto: 02.142
12. LIMA, N A; OLIVEIRA, L N; CAPELLE, K W. Density-functional study of the Mott gap in the Hubbard model. *Europhys. Lett.*, Les Ulis, vol. 60, n. 4, p. 601-607, Nov. 2002. Fator de impacto: 02.228
13. OLIVEIRA, L N. Braz. J. Phys., Sao Paulo, vol. 32, n. 2B, p. 671-672, Jun. 2002. [Resenha da Obra: CONTINENTINO, Mucio A. Quantum Scaling in Many-Body Systems. Singapore, World Scientific, 2001.]. Resenha. Fator de impacto: 00.671
14. ACCIOLY, A J; RAGUSA, S. Gravitational deflection of massive particles in classical and semiclassical general relativity. *Class. Quantum Gravity*, Bristol, vol. 19, n. 21, p. 5429-5434, Nov. 2002. Fator de impacto: 01.989
15. RAGUSA, S. Nonsymmetric unified theory of gravitation, electromagnetism and Yang-Mills field. *Class. Quantum Gravity*, Bristol, vol. 19, n. 23, p. 5969-5986, Dec. 2002. Fator de impacto: 01.989

Artigo de Jornal – Nacional

1. BEZERRA, R M; BARREIRO, A C M. A progressao continuada: pros e contras. Primeira Pagina, Sao Carlos, 07 jul. 2002. p. D7.
2. FONTANA, C R; BARREIRO, A C M. O professor: alem do saber, o show e a arte. Primeira Pagina, Sao Carlos, 04 ago. 2002. p. D7.
3. SILVA, M; BARREIRO, A C M. A importancia da preparacao pedagogica para os alunos de pos-graduacao das areas das Ciencias Exatas e Biologicas. Primeira Pagina, Sao Carlos, 31 mar. 2002. 1.
4. TAMBELLI, C E C; BARREIRO, A C M. Jean Piaget e a escola. Primeira Pagina, Sao Carlos, 30 jun. 2002. p. D7.
5. ZUCOLOTO, V; BARREIRO, A C M. Internet como ferramenta de ensino: o papel do professor. Primeira Pagina, Sao Carlos, 16 jun. 2002. 1.

Trabalho de Evento-Anais Periódico – Internacional

1. BRITO, F C; EGUES, J C. Shot noise in the presence of spin-flip scattering. *Braz. J. Phys.*, Sao Paulo, vol. 32, n. 2A, p. 324-326, Jun. 2002. /Apresentado a(ao) Brazilian Workshop on Semiconductor Physics, 10, Guaraju, 2002./ Fator de impacto: 00.671
2. FREIRE, H J P; EGUES, J C. Subband structure of II-VI modulation-doped magnetic quantum wells. *Braz. J. Phys.*, Sao Paulo, vol. 32, n. 2A, p. 327-330, Jun. 2002. /Apresentado a(ao) Brazilian Workshop on Semiconductor Physics, 10, Guaraju, 2002./ Fator de impacto: 00.671
3. SOUZA, F M; EGUES, J C. Bare LO-Phonon peak in THz-Emission signals: a dielectric-function analysis. *Braz. J. Phys.*, Sao Paulo, vol. 32, n. 2A, p. 415-417, Jun. 2002. /Apresentado a(ao) Brazilian Workshop on Semiconductor Physics, 10, Guaraju, 2002./ Fator de impacto: 00.671
4. OLIVEIRA, L N. A survey of glass research in Brazil. *J. Non-Cryst. Solids*, Amsterdam, vol. 304, n. 1-3, p. 1-3, Jun. 2002. /Apresentado a(ao) International Symposium on Non-Crystalline Solids in Brazil, 1/Brazilian Symposium on Glass and Related Materials, 5, Foz do Iguaçu, 2001./ Fator de impacto: 01.269

Trabalho de Evento-Resumo – Internacional

1. MASCARENHAS, Y P; GUERRINI, I M; GODOY, N; MAULE, A J P; MARQUES, A M P; ZUFFI, E M; MARIANO, I C B; BARREIRO, A C M; BOSSOLAN, N R S; ARAUJO, A P U; GIANOTTI, R A. Development and evaluation of a participative university pedagogy for the teaching of science and mathematics in high school. In: International Conference on Science and Mathematics Education, 2002, Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, ICSU, 2002. 1 p..
2. VIVEIRO, A A; BARREIRO, A C M. Ensinar ciência para crianças: o conhecimento físico no ensino fundamental. In: Simposio Internacional de Iniciacao Cientifica da Universidade de Sao Paulo, 10, Sao Carlos, 2002. Resumos. Sao Carlos, Universidade de Sao Paulo, 2002. res. 114. Em CD-ROM.

Trabalho de Evento-Resumo – Nacional

1. MANTOVANI, K C; SCHIEL, D; BARREIRO, A C M. Analisando a aplicacao da informatica na educacao de jovens e adultos: e possivel que a informatica contribua para a construcao de

- modelos científicos em eletrodinâmica. In: Encontro de Pesquisa em Ensino de Física, 8, 2002, Aguas de Lindoia. Programa e resumos. Aguas de Lindoia, Sociedade Brasileira de Física, 2002. p. 48.
2. FREIRE, H J P; EGUES, J C. Estrutura de subbanda dependente de spin em poços quânticos digitais magnéticos do grupo II-VI dopados por modulação. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 476.
 3. FREIRE, H J P; EGUES, J C. Simulação de segregação e interdifusão em heteroestruturas digitais magnéticas. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 489.
 4. FREIRE, H J P; EGUES, J C; CAPELLE, K. Utilizando a DFT no estudo de heteroestruturas semicondutoras magnéticas - uma análise comparativa de parametrizações para o potencial de troca e correlação. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 492-493.
 5. FREIRE, H J P; MENEZES, J C E. Estrutura eletrônica de poços quânticos magnéticos rasos. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
 6. SOUZA, F M; EGUES, J C. Corrente e ruído em ponto quântico acoplado a contatos ferromagnéticos. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
 7. BOTELHO, D F; FONTANARI, J F. Os efeitos do processo de recombinação na catraca de Muller. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
 8. CARDOZO, G O; FONTANARI, J F. Origem e evolução de sistemas auto catalíticos. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
 9. MAIA, L P; FONTANARI, J F. Inferência ancestral em evolução molecular. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
 10. ROSAS, A; FERREIRA, C P; FONTANARI, J F. Estabilidade e propriedades críticas de replicadores na rede. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 94-95.
 11. CAMPO JR, V L; OLIVEIRA, L N. Condução eletrônica no transistor de um elétron: modelo de Anderson fora de equilíbrio. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 448.
 12. CAMPO JUNIOR, V L; OLIVEIRA, L N. Condução eletrônica no transistor de um elétron: modelo de Anderson fora do equilíbrio. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
 13. LIMA, N A; OLIVEIRA, L N; CAPELLE, K W. Density-functional study of the Mott gap in the one-dimensional Hubbard model. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 489.
 14. ROCHA JUNIOR, K; OLIVEIRA, L N. Tamanho da nuvem Kondo. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
 15. SERIDONIO, A C F; OLIVEIRA, L N. Novos métodos para cálculo de propriedades de impurezas em metais. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
 16. CASTRO, P A; ONODY, R N. Otimização, ruído e criticidade auto-organizada em sistemas discretos. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 102.
 17. CASTRO, P A; ONODY, R N. Criticidade auto-organizada, otimização e biodiversidade. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
 18. LOBO, M P; ONODY, R N. Modelos evolucionários de envelhecimento: formas alternativas de reprodução. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
 19. ONODY, R N; LOBO, M P. Modelos evolucionários de envelhecimento: incorporação dinâmica dos parâmetros. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 100-101.
 20. ACCIOLY, A J; RAGUSA, S; MUKAI, H. Tree-level violation of the equivalence principle. In: Encontro Nacional de Física de Partículas e Campos, 23, Aguas de Lindoia, 2002. Resumos. São Paulo, SBF, 2002. p. 71-72.
 21. RAGUSA, S; BOSQUETTI, D. Worldline deviation in a nonsymmetric unified theory. In: Encontro Nacional de Física de Partículas e Campos, 23, Aguas de Lindoia, 2002. Resumos. São Paulo, SBF, 2002. p. 51-52.
 22. RAGUSA, S; CELERI, L. Desvio de um Graviton pelo Sol. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
 23. BAPTISTA, M S; GREBOGI, C; KOBERLE, R. Characterization of complexity in neurons. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 72.

Material Didático – Nacional

1. SCHIEL, D; LIBERO, V L; CARVALHO, C B G; HONEL, J; OLIVEIRA, H J Q. Introdução a astronomia. São Carlos, Setor de Astronomia - IFSC, c2002. CD-ROM.

Recursos Financeiros – Projetos de Pesquisa

1. USP, Pró-Reitoria de Pesquisa, R\$ 3.000,00, a partir de 23/06/1999 até o presente, Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes.
2. FAPESP, Proc. 1996/09930-3, R\$ 37.345,60 + US\$ 49.370,29 + R\$ 7.928,50 (reserva técnica), "Laboratório de Neurociências 'Dipteralab'", 01/04/1997 a 30/05/2003, Prof. Dr. Roland Köberle.
3. USP, Pró-Reitoria de Pesquisa, R\$ 5.000,00, "Projeto Especial Laboratório de Neurociências 'Dipteralab'", indeterminado, Prof. Dr. Roland Köberle.
4. FAPESP, Proc. 1999/08593-1, R\$ 441,00 + US\$ 140.712,33, "Serviço de Biblioteca e Informação" - FAP Livros, 01/09/2000 a 30/11/2002, Prof. Dr. Roland Köberle.
5. USP, Pró-Reitoria de Pesquisa, R\$ 3.500,00, "Projeto Especial 1 (2002) Laboratório de Neurociências 'Dipteralab'", indeterminado, Prof. Dr. Roland Köberle.
6. USP, Pró-Reitoria de Cultura e Extensão Universitária, R\$ 3.000,00, a partir de novembro de 2000 Prof. Dr. Valtér Luiz Libero.
7. FAPESP, Proc. 99/09644-9, R\$ 108.000,00 + R\$ 40.000,00 (reserva técnica), "Evolução Molecular Teórica", de 01/3/2000 a 29/02/2004, Prof. Dr. José Fernando Fontanari.
8. FAPESP, Proc. 2000/11625-1, R\$ 7.150,00 + R\$ 1.787,50 (reserva técnica), "A) A Teoria Unificada da Gravitacão-Eletromagnetismo; B) Teoria Não-Simétrica da Gravitacão", de 01/01/2001 a 31/12/2002, Prof. Dr. Silvestre Ragusa.
9. FAPESP, Proc. 2001/00719-8, R\$ 46.540,00, "Métodos Não-Perturbativos em Sistemas Eletrônicos Coordenados", de 01/05/2001 a 30/04/2004, Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira, Pesquisador Principal (Projeto coordenado pelo Prof. Dr. Amir O Caldeira, da UNICAMP).
10. FAPESP, Proc. 2001/08643-0, R\$ 25.790,00 + R\$ 6.447,50 (reserva técnica), "Algoritmos de Otimização", de 01/11/2001 a 31/10/2003, Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody.
11. USP, Pró-Reitoria de Pesquisa, R\$ 2.579,00, (recebido em 2002) - "Projeto Especial 1 Algoritmos e Otimização", indeterminado, Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody.
12. FAPESP, Proc. 2000/05047-5, Auxílio Jovem Pesquisador em Centro Emergente, valor: R\$ 83.098 + R\$ 12.774,50 (reserva técnica), "Simulações Numéricas de Larga Escala em Teorias de Gauge na Rede e Mecânica Estatística", vigência de 01/02/2001 a 31/01/2005, Dr. Attilio Cucchiari.
13. FAPESP, Proc. 2002/03565-4, Auxílio à Pesquisa – Temático, valor: R\$ 65.000,00 + R\$ 20.000,00 (reserva técnica), "Explorando o Código Neural da Mosca", vigência de 01/12/2002 a 30/11/2006, Prof. Dr. Roland Köberle.
14. FAPESP, Auxílio Professor Visitante – Projeto Edvaldo Nogueira Júnior – Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, R\$ 39.301,35 (manutenção do visitante e passagem aérea), vigência 01/02/2002 a 31/01/2003, Prof. Dr. José Fernando Fontanari.
15. USP, Pró-Reitoria de Pesquisa, R\$ 3.500,00, Proc. 2002.1.10253.1.0 – "Projeto Especial 1 – Métodos Não-Perturbativos em Sistemas Eletrônicos Correlacionados", indeterminado, Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira.
16. FAPESP, Proc. 98/00358-0, "Reserva Técnica de bolsa de Pós-Graduação, Doutorado – NEEMIAS ALVES DE LIMA", vigência: 01/04/1998 a 31/03/2002, valor de R\$ 8.459,89. Coordenador: LUIZ NUNES DE OLIVEIRA.
17. FAPESP, Proc. 98/16523-0, "Reserva Técnica de bolsa de Pós-Graduação, Doutorado – MARCELO FERREIRA DA SILVA", vigência: 01/06/1999 a 31/03/2002, valor de R\$ 9.631,04. Coordenador: LUIZ NUNES DE OLIVEIRA.

18. FAPESP, Proc. 2000/09/97-9, "Reserva Técnica de bolsa de Pós-Graduação, Doutorado – KERSON DA ROCHA JUNIOR", vigência: 01/12/2000 a 29/02/2004, valor de R\$ 17.892,00. Coordenador: LUIZ NUNES DE OLIVEIRA.
19. FAPESP, Proc. 99/13020-0, "Reserva Técnica de bolsa de Pós-Graduação, Mestrado – ANTONIO CARLOS FERREIRA SERIDÔNIO", vigência: 01/03/2000 a 28/02/2002, valor de R\$ 3.906,07. Coordenador: LUIZ NUNES DE OLIVEIRA.
20. FAPESP, Proc. 97/14251-0, "Reserva Técnica de bolsa de Pós-Graduação, Doutorado – LUIS ROBERTO RAMOS", vigência: 01/05/1998 a 30/04/2002, valor de R\$ 9.679,11. Coordenador: VALTER LUIZ LIBERO.
21. FAPESP, Proc. 99/06868-3, "Reserva Técnica de bolsa de Pós-Graduação, Doutorado – HENRIQUE JOTA DE PAULA FREIRE", vigência de 01/10/1999 a 30/09/2003, valor de R\$ 24.264,00. Coordenador: JOSÉ CARLOS EGUES DE MENEZES.
22. FAPESP, Proc. 00/10650-2, "Reserva Técnica de bolsa de Pós-Graduação, Doutorado – FABRÍCIO MACEDO DE SOUZA", vigência de 01/12/2000 a 31/03/2004 (40 meses), valor de R\$ 11.518,99. Coordenador: JOSÉ CARLOS EGUES DE MENEZES.
23. FAPESP, Proc. 99/11524-1, "Reserva Técnica de bolsa de Pós-Graduação, Mestrado – LEONARDO KLEBER CASTELANO", vigência de 01/03/2000 a 28/02/2002, valor de R\$ 6.361,21. Coordenador: LIDÉRIO CITRÂNGULO IORIATTI JÚNIOR.
24. FAPESP, Proc. 99/11245-5, "Reserva Técnica de bolsa de Pós-Graduação, Mestrado – MATHEUS JATKOSKE LAZO", vigência de 01/03/2000 a 28/02/2002, valor de R\$ 4.558,57. Coordenador: SILVESTRE RAGUSA.
25. FAPESP, Proc. 00/14036-7, "Reserva Técnica de bolsa de Pós-Graduação, Mestrado – DANIELA FAVARÃO BOTELHO", vigência de 01/03/2001 a 28/02/2003, valor de R\$ 4.278,00. Coordenador: JOSÉ FERNANDO FONTANARI.
26. FAPESP, Proc. 2000/06044-0, "Reserva Técnica de bolsa de Pós-Graduação, Doutorado – ALEXANDRE COLATO", vigência de 01/08/2000 a 31/07/2004, valor de R\$ 11.520,00. Coordenador: JOSÉ FERNANDO FONTANARI.
27. FAPESP, Proc. 2000/00972-2, "Reserva Técnica de bolsa de Pós-Graduação, Doutorado – LEONARDO PAULO MAIA", vigência de 01/05/2000 a 30/04/2004, valor de R\$ 17.892,00. Coordenador: JOSÉ FERNANDO FONTANARI.
28. FAPESP, Proc. 01/14974-0, "Reserva Técnica de bolsa de Pós-Graduação, Doutorado – ANTONIO CARLOS FERREIRA SERIDÔNIO", vigência: 01/04/2002 a 31/03/2005, valor de R\$ 5.148,00. Coordenador: LUIZ NUNES DE OLIVEIRA.
29. FAPESP, Proc. 01/13277-3, "Reserva Técnica de bolsa de Pós-Graduação, Doutorado – GIOVANO DE OLIVEIRA CARDOZO", vigência de 01/03/2002 a 28/02/2005, valor de R\$ 11.520,00. Coordenador: JOSÉ FERNANDO FONTANARI.
30. FAPESP, Proc. 02/04824-3, "Reserva Técnica de bolsa de Pós-Graduação, Mestrado – DEUSDEDIT LINEU SPAVIERI JÚNIOR", vigência de 01/09/2002 a 31/08/2004, valor de R\$ 6180,00. Coordenador: ROLAND KOBERLE.
31. FAPESP, Proc. 02/02809-7, "Reserva Técnica de bolsa de Pós-Graduação, Doutorado – AMILTON DE MATOS TEIXEIRA", vigência de 01/06/2002 a 31/05/2005, valor de R\$ 5.148,00. Coordenador: VALTER LUIZ LIBERO.

Bolsas Produtividade em Pesquisa

1. Prof. Dr. José Fernando Fontanari, Bolsa Pesquisador 1C, 01/08/2000 a 31/07/2003, CNPq.
2. Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira, Bolsa Pesquisador 1B, 01/08/2000 a 31/07/2003, CNPq.
3. Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody, Bolsa Pesquisador 2A, 01/03/2002 a 28/02/2004, CNPq.
4. Prof. Dr. Roland Köberle, Bolsa Pesquisador 1A, 01/08/2000 a 31/07/2003, CNPq.
5. Prof. Dr. Valter Luiz Libero, Bolsa de Pesquisador, 2C, 01/03/2001 a 28/02/2003, CNPq

D. Atividades Acadêmicas e de Extensão Universitária

Atividades Didáticas

Graduação

-  **Profa. Dra. Aguida Celina de Méo Barreiro**
 1. FFI 325 Psicologia da Educação, 1 turma, Anual, teórica, carga horária total 120h.
 2. SLC 554 Psicologia da Educação, 1 turma, Anual, teórica, carga horária total 120h.
-  **Prof. Dr. Djalma Mirabelli Redondo**
 1. FFI 112 Física Matemática I, 1 turma, 1º semestre de 2002, teórica, carga horária total 60h.
 2. FFI 115 Física Matemática II, 1 turma, 2º semestre de 2002, teórica, carga horária total 60h.
-  **Prof. Dr. José Fernando Fontanari**
 1. FCM 121 Estado Sólido I, 1 turma, 2º semestre de 2002, teórica, carga horária total 60h.
-  **Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior**
 1. FFI 119 Mecânica Quântica I, 1º semestre de 2002, teórica, carga horária total 60h.
 2. FFI 122 Mecânica Quântica II, 2º semestre de 2002, teórica, carga horária total 60h.
-  **Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira**
 1. FFI 305 Introdução à Física Matemática, 2º semestre de 2002, teórica, carga horária total 60h.
-  **Prof. Dr. Rogério Cantarino Trajano da Costa**
 1. FFI 128 Introdução à História da Física I, 1 turma, 2º semestre de 2002, teórica, carga horária total 30h.
-  **Prof. Dr. Valter Luiz Libero**
 1. FFI 105 Física III, 1º semestre de 2002, teórica, carga horária total 90h
 2. FFI 108 Física IV, 2º semestre de 2002, teórica, carga horária total 90h.
 2. SLC 516 Astronomia, 1 turma, 2º semestre de 2002, teórica, carga horária total 60h.

Pós-Graduação

-  **Profa. Dra. Aguida Celina de Méo Barreiro**
 1. SFI 5813 Práticas de Ensino de Física A, 1º semestre de 2002, 2 créditos, carga horária total 30h.
 2. SFI 5835 Práticas Pedagógicas e Comunicação e Expressão 1-2, 1º semestre de 2002, 4 créditos, carga horária total 60h.
 3. SFI 5826 Práticas de Ensino de Física B, 2º semestre de 2002, 2 créditos, carga horária total 30h.
 4. SFI 5836 Práticas Pedagógicas & Comunicação e Expressão Oral, 2º semestre de 2002, 4 créditos, carga horária total 60h.
-  **Prof. Dr. José Fernando Fontanari**
 1. SFI 5838 Mecânica Estatística Avançada, 1º semestre de 2002, 16 créditos, carga horária total 195h.
 2. SFI 5776 Seminários Avançados de Teoria de Campos e Transição de Fase, 2º semestre de 2002, 8 créditos, carga horária total 120h.
-  **Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody**
 1. SFI 5704 Mecânica Estatística A, 1º semestre de 2002, 16 créditos, carga horária total 240h.

3. SFI 5707 Mecânica Estatística B, 2º semestre de 2002, 16 créditos, carga horária total 240h.
4. SFI 5759 Teoria de Transição de Fase e Fenômenos Críticos, 1º semestre de 2002, 13 créditos, carga horária total 195h.

 Prof. Dr. Roland Koberle

1. SFI 5734 Tópicos em Teoria de Muitos Corpos, 1º semestre de 2002, 16 créditos, carga horária total 195h.
2. SFI 5833 Mecânica Quântica Relativística, 2º semestre de 2002, 16 créditos, carga horária total 195h.

Atividades de Extensão

 Prof. Dra. Aguida Celina de Méo Barreiro

1. Projeto do IEA/USP - "Desenvolvimento e avaliação de uma pedagogia universitária participativa no Ensino Médio: atividades com ênfase em matemática, ciências e comunicação". Em colaboração com a Prof. Ynone Primeirano Mascarenhas (coordenadora). Instituições envolvidas: Instituto de Estudos Avançados – São Carlos e Escola Sebastião de Oliveira Rocha. Financiamento FAPESP, vigência: 15/02/2001 a 14/02/2003.

 Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior

1. Coordenador do IFSC/USP na Feira de Profissões da USP, realizada em Piracicaba, SP

 Prof. Dr. Valter Luiz Libero

1. Curso de Astronomia, ministrado no SESC de Araçatuba, em Araçatuba, SP, de 17 a 19/07/2002.
2. Curso oferecido à Universidade Aberta à Terceira Idade, IFSC/USP, 1º semestre de 2002.

Orientação Acadêmica e Bolsistas

Pós-Doutoramento

 Prof. Dr. José Fernando Fontanari

1. Alexandre da Silva Rosas, "Origem e evolução de sistemas auto-catalíticos", FAPESP Processo no. 01/08159-1, vigência de 01/10/2001 a 30/09/2002.
2. Attilio Cucchiari, "Simulações numéricas de larga escala", FAPESP Processo no. 00/07215-2 (vinculado ao auxílio Jovem Pesquisador – Processo no. 00/05047-5), vigência de 01/02/2001 a 31/01/2003.
3. Paulo Roberto de Araújo Campos, "Evolução dinâmica e flogenia em relevos rugosos", FAPESP Processo no. 01/06138-7, vigência de 01/09/2001 a 31/08/2003.
4. Viviane Moraes de Oliveira, "Dinâmica de replicadores com interações de alta ordem", FAPESP Processo no. 00/05446-7, vigência de 01/08/2000 a 31/07/2003.
5. Tereza Cristina Rocha Mendes, "Simulações numéricas de larga escala", FAPESP Processo no. 00/07216-9 (vinculado ao auxílio Jovem Pesquisador – Processo no. 00/05047-5), vigência de 01/02/2001 a 31/01/2003.
6. Willem Hordijk, "Evolução integradores de informação pré-bióticos através de algoritmos genéticos", FAPESP, Processo no. 02/01038-7, vigência de 01/06 a 30/11/2002.

 Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

1. Jorge Quintanilla Tizon, "Abordagem de funcional da densidade para a relação entre supercondutividade e antiferromagnetismo", FAPESP Processo no. 01/10461-8, vigência de 01/02/2002 a 31/01/2003.

 Prof. Dr. Valter Luiz Libero

1. João Vitor Batista Ferreira, "Propriedades termodinâmicas e dinâmicas do modelo de Anderson de dois canais", FAPESP Processo no. 00/11787-1, vigência de 01/02/2001 a 18/03/2002.

Doutoramento

 Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes

1. Fabrício Macedo de Souza, "Spin-dependent Quantum shot noise", CAPES, de 1/4 a 31/10/2000 e "Spin-Dependente Quantum Shot Noise", FAPESP Processo no. 00/10650-2, vigência de 01/12/2000 a 31/11/2004.
2. Henrique Jota de Paula Freire, "Spin-dependent physics in MN-based heterostructures and related topics", FAPESP Processo no. 99/06868-3, vigência de 01/10/1999 a 30/09/2003.

 Prof. Dr. José Fernando Fontanari

1. Alexandre Colato, "Inferência Ancestral em Evolução Pré-biótica", FAPESP Processo no. 2000/06044-0, vigência de 01/08/2000 a 31/07/2004.
2. Leonardo Paulo Maia, "Métodos de Monte Carlo para inferência ancestral em evolução molecular", FAPESP Processo no. 00/00972-0, vigência de 01/05/2000 a 30/04/2004. (observação: de 01/05/2000 a 28/02/2001 era aluno da UFSCar, com outro Orientador).
3. Giovano de Oliveira Cardozo, "Origem e evolução de sistemas auto-catalíticos", FAPESP Processo no. 01/13277-3, vigência de 01/03/2002 a 28/02/2005.

 Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior

1. Antonio Sérgio dos Santos, "Método hiper-esférico aplicado ao estudo do íon D⁺ na presença de um campo magnético", CNPq, de 04/1998 a 02/2001 e CAPES, de 03/2001 a 02/2002 (co-orientação).

 Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

1. Kerson Rocha Júnior, "Tamanho da Nuvem Kondo" CNPq, vigência de 01/03 a 30/11/2000 e FAPESP Processo no 00/09797-9, vigência de 01/12/2000 a 29/02/2004.
2. Marcelo Ferreira da Silva, "Estruturas de banda de antiferromagnetos com ondas de densidade de spin via novo procedimento de funcional da densidade", CNPq, vigência de 01/04/98 a 31/05/99 e FAPESP Processo no. 98/16523-0, vigência de 01/06/1999 a 31/03/2002.
3. Neemias Alves de Lima, "Teoria do funcional da matriz de densidade aplicada a polímeros", FAPESP Processo no. 98/00358-0, vigência de 01/04/98 a 31/03/2002.
4. Vivaldo Leiria Campo Júnior, "Condução eletrônica através de um contato quântico pontual", CAPES, vigência de 01/05/1999 a 30/04/2003.
5. Antonio Carlos Ferreira Seridônio, "Novos métodos para cálculo de propriedades de impurezas em metais", FAPESP Processo no. 01/14974-0, vigência de 01/04/2002 a 31/03/2005.

 Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody

1. Paulo Alexandre de Castro, "Criticalidade auto-organizada em sistemas físicos e biológicos", CNPq, vigência de 01/04/2002 a 28/02/2003.

 Prof. Dr. Roland Koberle

1. Damian Ernesto Oliva, "O código neural da mosca", FAPESP Processo no. 02/01037-0, vigência de 01/08/2002 a 31/07/2006.

 Prof. Dr. Valter Luiz Libero

1. Luis Roberto Ramos, "Condutividade elétrica devido a impurezas magnéticas em metais", FAPESP Processo no. 97/14251-0, vigência de 01/04/98 a 30/04/2002.
2. Amilton de Matos Teixeira, "Modelo Kondo de 2 canais com anisotropia de troca e de canais", FAPESP Processo no. 02/01809-7, vigência de 01/06/2002 a 31/05/2005.

Mestrado

 Prof. Dra. Aguida Celina de Méo Barreiro.

1. Kátia Cristina Cota Mantovani, Programa de Pós-Graduação em Educação para Ciência – Área de Concentração Ensino de Ciências, UNESP, Faculdade de Ciências, Campus de Baurui, de outubro de 2001 a 16/09/2002.

 Prof. Dr. José Fernando Fontanari

1. Daniela Favarão Botelho, "Dinâmica e genealogia de modelos de genética de populações com recombinação", FAPESP Processo no. 00/14036-7, vigência de 01/03/01 a 28/02/03.
2. Danielle Oliveira Costa Santos, "Ecosistemas de replicadores", CAPES, vigência de 01/08/2002 a 31/07/2003.

 Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior

1. Leonardo Kleber Castellano, "Interferência entre modos vibracionais e excitações eletrônicas em super-redes semicondutoras dopadas", FAPESP Processo no. 99/11524-1, vigência de 01/03/2000 a 28/02/2002.

 Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

1. Antonio Carlos Ferreira Seridônio, "Influência do efeito Kondo na condutância de contactos pontuais em superfícies metálicas", FAPESP Processo no. 99/13020-0, vigência de 01/03/2000 a 28/02/2002.

 Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody

1. Paulo Alexandre de Castro, "Algoritmos e otimização", CNPq, vigência de 01/03/2000 a 28/02/2002.
2. Matheus Pereira Lobo, "Modelos evolucionários de envelhecimento", CAPES, de 01/08/2001 a 28/02/2003.

 Prof. Dr. Roland Koberle

1. Deuseodir Lineu Spavieri Junior, "Explorando o código neural da mosca", FAPESP Processo no. 02/04824-3, vigência de 01/09/2002 a 31/08/2004.

 Prof. Dr. Silvestre Ragusa

1. Matheus Jatkoske Lazo, "Radiação eletromagnética e gravitacional", FAPESP Proc. 99/11245-5, vigência de 01/03/2000 a 28/02/2002.
2. Lucas Chibebe Céleri, "Teoria da gravitação não-simétrica: radiação de energia gravitacional e tensor momentum de energia de um fluido", CAPES, Prof. S. Ragusa assumiu a orientação em agosto de 2002, vigência da bolsa: de agosto de 2002 a fevereiro de 2003.

Iniciação Científica

 Profa. Dra. Aguida Celina de Méo Barreiro

1. Alessandra Aparecida Viveiro, "Ensinando ciências para crianças: o conhecimento físico no ensino fundamental", CNPq/PIBIC, vigência de agosto de 2001 a julho de 2002.

 Prof. Dr. Roland Koberle

1. Nelson Mesquita Fernandes, "Calibrando a posição dos nomatídeos", CNPq/PIBIC, com bolsa desde agosto de 2002 a julho de 2003.

Teses e Dissertações Concluídas por Docentes e Alunos

Doutorado

 Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

1. Neemias Alves de Lima, "Teoria do funcional da densidade para sistema espacialmente correlacionados", FAPESP, 26/04/2002, Orientador: Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira.
2. Marcelo Ferreira da Silva, "Teoria do funcional da densidade e magnetismo no modelo de Hubbard", FAPESP, 16/08/2002, Orientador: Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira.

 Prof. Dr. Valter Luiz Libero

1. Luis Roberto Ramos, "Propriedades termodinâmicas do modelo de Falikov-Kimball de duas impurezas em spin", FAPESP, 29/11/2002, Orientador: Prof. Dr. Valter Luiz Libero.

Mestrado

 Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior

1. Leonardo Kleber Castelano, "Auto-energia de fônons Lo em super-redes delta-dopadas", FAPESP, 12/04/2002, Orientador: Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior.

 Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

1. Antonio Carlos Ferreira Seridônio, "Influência do efeito Kondo na condutância de contatos pontuais de superfícies metálicas", 05/04/2002, FAPESP, Orientador: Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira.

 Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody

1. Paulo Alexandre de Castro, "Algoritmos de otimização e criticalidade auto-organizada", 22/04/2002, CNPq, Orientador: Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody.

 Prof. Dr. Silvestre Ragusa

1. Matheus Jatkoske Lazo, "Emissão de momentum angular – massa eletromagnética na teoria de Maxwell e na não-linear de Born-Infeld", 14/03/2002, FAPESP, Orientador: Prof. Dr. Silvestre Ragusa.

Participação em Comissões Julgadoras no IFSC

Exame de Qualificação

 Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior

1. Sérgio Ricardo Muniz, monografia: "Two-species mixture of quantum degenerate Bose and Fermi gases", IFSC/USP, 10/07/2002.
2. Samuel Leite de Oliveira, monografia: "Quantum efficiency of 1460 nm transition and energy transfer in Tm3+ doped glass", IFSC/USP, 25/07/2002.

 Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody

1. Andréa Gomes Campos, monografia: "Modelling deposition of surface texture", IFSC/USP, 14/08/2002.

 Prof. Dr. Roland Koberle

1. Luiz Gonzaga Rios Filho, monografia: "Modelagem e simulação de neurônios em meios heterogêneos", IFSC/USP, 29/05/2002.

 Prof. Dr. Valter Luiz Libero

1. Silvio César Garcia Granja, monografia: "Medidas quânticas não-demolitivas de um Qubit", IFSC/USP, 09/08/2002.

Dissertação de Mestrado

 Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior

1. Matheus Jatkoske Lazo, "Emissão de momentum angular – massa eletromagnética na teoria de Maxwell e na não-linear de Born-Infeld", IFSC/USP, 14/03/2002.
2. Leonardo Kleber Castelano, "Auto-energia de fônons Lo em super-redes delta-dopadas", IFSC/USP, 12/04/2002.

 Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

1. Antonio Carlos Ferreira Seridônio, "Influência do efeito Kondo na condutância de contatos pontuais de superfícies metálicas", IFSC/USP, 05/04/2002.

 Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody

1. Paulo Alexandre de Castro, "Algoritmos de otimização e criticalidade auto-organizada", IFSC/USP, 22/04/2002.

 Prof. Dr. Silvestre Ragusa

1. Matheus Jatkoske Lazo, "Emissão de momentum angular – massa eletromagnética na teoria de Maxwell e na não-linear de Born-Infeld", IFSC/USP, 14/03/2002.

Tese de Doutorado

 Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior

1. Diógenes Bosqueti, "Algoritmos de evolução temporal aplicados a sistemas acústicos unidimensionais", IFSC/USP, 05/03/2002.
2. Neemias Alves de Lima, "Teoria do funcional da densidade para sistema espacialmente correlacionados", IFSC/USP, 26/04/2002.
3. Marcelo Ferreira da Silva, "Teoria do funcional da densidade e magnetismo no modelo de Hubbard", IFSC/USP, 16/08/2002.

 Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

1. Neemias Alves de Lima, "Teoria do funcional da densidade para sistema espacialmente correlacionados", IFSC/USP, 26/04/2002.
2. Marcelo Ferreira da Silva, "Teoria do funcional da densidade e magnetismo no modelo de Hubbard", IFSC/USP, 16/08/2002.

 Prof. Dr. Valter Luiz Libero

1. Luis Roberto Ramos, "Propriedades termodinâmicas do modelo de Falikov-Kimball de duas impurezas em spin", IFSC/USP, 29/11/2002.

 Prof. Dr. Silvestre Ragusa

1. Diógenes Bosqueti, "Algoritmos de evolução temporal aplicados a sistemas acústicos unidimensionais", IFSC/USP, 05/03/2002.

Livre-Docência

 Prof. Dr. Roland Koberle

1. José Carlos Egues de Menezes, "Filtragem quântica e transporte spin polarizado", FFI/ IFSC/USP, 14 e 15/03/2002.

Participação em Comissões Julgadoras Externas ao IFSC

Dissertação de Mestrado

 Profa. Dra. Aguida Celina de Méo Barreiro.

1. Vana Beatriz Soares do Amaral, "A importância da comunicação no desenvolvimento das relações interpessoais: uma análise da prática docente no curso de pedagogia de Itubiera-GO", Centro Universitário do Triângulo – UNIT – Pró-Reitoria de Pós-Graduação, Pesquisa e Extensão, Uberlândia, MG, 15/03/2002.

- Luiz Antônio Fernandes, "A avaliação da aprendizagem na disciplina física na educação superior", Centro Universitário do Iriângulo – UNII – Pró-Reitoria de Pós-Graduação, Pesquisa e Extensão, Uberlândia, MG, 05/07/2002.

Tese de Doutorado

Prof. Dr. José Fernando Fontanari.

- Josué Xavier de Carvalho, "Criticalidade autoorganizada no modelo OFC", IFUSP, São Paulo, SP, 22/03/2002.

Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody.

- Joaquim Elias de Freitas - "Estudos de Alguns Sistemas Complexos: Percolação Dependente do Tempo, Aplicação a Problemas de Petróleo, Percolação de Longo Alcance e Modelo de Reação-Difusão", Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, RN, 21/03/2002.

Outros

Prof. Dr. Silvestre Ragusa

- Membro de Comissão Julgadora, Processo Seletivo para contratação de docente, na Universidade de Brasília, Brasília, DF, 07 a 13/04/2002
- Membro da Comissão Julgadora para Provimento de Cargo de Professor Assistente, candidato Prof. Dr. Hélio Vasconcelos Fagundes, no Instituto de Física Teórica, da UNESP, São Paulo, SP, 27 a 28/08/2002.
- Membro da Comissão Julgadora do Concurso para Professor Doutor, candidato Dr. Alexandre Souto Martinez, no Departamento de Física Matemática, da Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, USP, Ribeirão Preto, SP, 29 a 30/10/2002.

Concursos Realizados pelos Docentes como Candidatos

Livre-Docência

Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes

- "Filtragem quântica e transporte spin polarizado", tese apresentada para obtenção do título de Livre-Docente, FFI/IFSC/USP, 14 a 15/03/2002.

Oferecimento de Estágios, Treinamento de Pessoal, Seminários e Palestras

Seminários

Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody

- "Otimização, ruído e criticalidade auto-organizada em sistemas discretos", Departamento de Física Teórica e Experimental, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, RN, 22/02/2002.

Prof. Dr. Silvestre Ragusa

- "Relatividade restrita: previsões e confirmação experimental", Departamento de Física Matemática, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, USP, 16/05/2002.
- "Fóton de Einstein: interface entre os três famosos trabalhos de 1905", Departamento de Física Matemática, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, USP, 17/05/2002.
- "O pósitron, neutrino e méson π : previsão e descoberta", Departamento de Física Matemática, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, USP, 25/06/2002.
- "A teoria do campo unificado da gravitação e eletromagnetismo de Einstein e seus desenvolvimentos, seminário proferido no Programa de Seminários dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC/USP, São Carlos, SP, 12/11/2002.

Palestras

Prof. Dr. José Fernando Fontanari

- "A origem da vida: são os genes egoístas?", palestra proferida no Instituto de Física Teórica, da UNESP, São Paulo, SP, 08/11/2002.

Prof. Dr. Roland Koberle

- "The tongue of the invertebrate brain: experiments and analyses of neural systems", Universidade de Brasília, Centro Internacional de Física da Matéria Condensada, Brasília, DF, 01 a 05 de julho de 2002.

Prof. Dr. Silvestre Ragusa

- "Relatividade restrita: previsões e confirmação experimental", palestra proferida no Departamento de Física, da Universidade Estadual de Maringá, durante a Semana da Física, Maringá, PR, 28/09/2002.

Prof. Dr. Valter Luiz Libero

- "Física: dos átomos à galáxia", palestra ministrada no SESC de São Carlos, São Carlos, SP, 29/05/2002.
- "Da Terra às Estrelas", palestra ministrada no SESC de Araçatuba, Araçatuba, SP, 20/07/2002.
- "A profissão do Físico", palestra ministrada na Academia Horácio Berlink de Jau, Jau, SP, 06/08/2002.
- "Astronomia e o relógio solar", palestra ministrada no Colégio Objetivo Júnior, São Carlos, SP, 19/09/2002.

Colóquios

Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

- "Como vai a pesquisa na USP?", colóquio ministrado no IFSC/USP, São Carlos, SP, 22/11/2002.

Prof. Dr. Roland Koberle

- "O nascimento da equação de Schrödinger", colóquio ministrado no IFSC/USP, São Carlos, SP, 05/04/2002.

Prof. Dr. Rogério Cantarino Trajano da Costa

- "A mecânica pré-newtoniana", colóquio ministrado no IFSC/USP, São Carlos, SP, 19/04/2002.
- "O processo de Galileu", colóquio ministrado no IFSC/USP, São Carlos, SP, 09/08/2002.

Prof. Dr. Silvestre Ragusa

- "Gradiente, fluxo, divergente e rotacional: origens e aplicações", colóquio ministrado no Departamento de Física Matemática, da Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, USP, Ribeirão Preto, SP, 04/06/2002.

Assessoria no Julgamento e Avaliação de Projetos

Profa. Dra. Aguida Celina de Méo Barreiro

Caderno Catarinense de Ensino de Física - 01 parecer.
CoC Licenciatura em Ciências Exatas – IFSC/IQSC/ICMC - 01 parecer.

Prof. Dr. Djalma Mirabelli Redondo

CPG IFSC/USP - 01 parecer.

Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes

Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes

Physics Letters A – 01 parecer.
Physical Review Letters – 04 pareceres.
Physical Review B – 03 pareceres.

Prof. Dr. José Fernando Fontanari

FAPESP – 06 pareceres.
USP/Pró-Reitoria de Pós-Graduação – Câmara Curricular – 19 pareceres
FCM/IFSC/USP – 02 pareceres.

Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior (nao está completo daqui para frente checar)

FAPESP – 06 pareceres.

Revista Brasileira de Ensino de Física – 01 parecer.

USP/Pró-Reitoria de Graduação – 05 pareceres.

 Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

FAPESP – 04 pareceres.

Coordenador Adjunto da FAPESP, área de Ciências Exatas.

Assessor da CAPES

Assessor do CNPq

Assessor da FUNDUNESP.

 Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody

Assessor “ad hoc” CNPq – 01 parecer

FAPESP – 01 parecer

Physics Letters A – 01 parecer

Physica A – 01 parecer

Revista Brasileira de Ensino de Física – 01 parecer

 Prof. Dr. Rogério Cantarino Trajano da Costa

Revista Brasileira de Ensino de Física – 03 pareceres.

 Prof. Dr. Roland Koberle

FAPESP - 16 pareceres

CNPq “ad hoc” - 02 pareceres.

 Prof. Dr. Silvestre Ragusa

FAPESP - 03 pareceres

 Prof. Dr. Valter Luiz Libero

FAPESP - 04 pareceres

Physical Review B – 01 parecer.

Serviços à Comunidade

 Profa. Dra. Aguida Celina de Mello Barreiro

1. Responsável por oito bolsistas do projeto financiado pela COSEAS/USP "Programa de Educação de Adultos através do Telecurso 2000" no Campus USP de São Carlos.

2. Dois bolsistas do: Projeto Pequeno Cidadão - Desenvolvimento de Trabalho de Orientação de Estudos com Crianças de Periferia: aspectos cognitivos e sociais da aprendizagem.

 Prof. Dr. Valter Luiz Libero

1. Coordenador de atividades do Centro de Divulgação da Astronomia (Observatório).

Responsabilidade de Docentes do FFI no Setor de Infra-Estrutura do IFSC

 Prof. Dr. Roland Koberle

1. Diretor da Biblioteca do IFSC/USP.

Representação e Participação em Comissões no IFSC

 Profa. Dra. Aguida Celina de Mello Barreiro

1. Professora responsável pelo Setor Biblioteca do Centro de Divulgação Científica e Cultural/USP, desde 1996.

 Prof. Dr. José Fernando Fontanari

1. Presidente da Comissão de Pós-Graduação do IFSC/USP, de 18/02/2002 a 17/02/2004.

2. Membro da Comissão de Pós-Graduação do IFSC/USP.

3. Representante Titular da categoria de Professor Associado na Congregação do IFSC/USP, 02/10/2000 a 01/10/2002 e de 28/10/2002 a 27/10/2004.

4. Representante Suplente da categoria de Professor Associado no Conselho Departamental do Departamento de Física e Informática, IFSC/USP, de outubro de 2000 a setembro de 2002 e de 23/10/2002 a 22/10/2004.

 Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior

1. Presidente da Comissão de Graduação do IFSC/USP, de 18/03/2002 a 17/03/2004.

2. Membro da Comissão de Graduação do IFSC/USP, de 18/03/2002 a 17/03/2005.

3. Representante Titular da categoria de Professor Associado junto ao Conselho do FFI, desde 01/09/1998.

4. Representante Suplente da categoria de Professor Associado junto à Congregação do IFSC, 02/10/2000 a 01/10/2002 e de 28/10/2002 a 17/10/2004.

5. Membro suplente na Comissão de Pós-graduação, de 02/08/1999 a 01/08/2002.

6. Representante do IFSC junto ao Conselho de Pesquisa, setembro de 2000 a fevereiro de 2002.

7. Coordenador do IFSC na II Feira de Profissões da USP/Campio Interior. Piracicaba, SP, 26 a 28/07/2002.

8. Coordenador do Programa de Colóquios do IFSC de abril de 2002 a fevereiro de 2003.

 Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

4. Membro Nato do Conselho Departamental do Departamento de Física e Informática, IFSC/USP

5. Membro Nato da Congregação do IFSC/USP.

 Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody

1. Membro da Comissão do Serviço de Biblioteca e Informação.

2. Representante Titular da categoria de Professores Associados junto ao Conselho do Departamento de Física e Informática de 29/08/1996 a 24/09/2002.

3. Representante Titular da categoria de Professores Associados junto à Congregação do IFSC, de 28/10/2002 a 27/10/2004.

4. Representante suplente da categoria de Professores Associados junto ao Conselho do Departamento de Física e Informática de 23/10/2002 a 22/10/2004.

5. Coordenador da área de Física Básica do Programa de Pós-Graduação do IFSC/USP, de 13/06/2001 a 26/08/2002.

 Prof. Dr. Roland Koberle

1. Membro da Comissão de Graduação do IFSC/USP, de 18/10/1999 a 17/10/2002.

2. Membro Nato do Conselho Departamental do Departamento de Física e Informática, IFSC/USP

3. Membro Nato da Congregação do IFSC/USP.

 Prof. Dr. Valter Luiz Libero

1. Representante do IFSC no Conselho do Centro de Divulgação Científica e Cultural.

2. Representante Titular dos Professores Doutores junto à Congregação do IFSC/USP, de 28/10/2002 a 27/10/2004.

3. Representante Suplente dos Professores Doutores junto ao Conselho do Departamento de Física e Informática, de 23/10/2002 a 22/10/2004.

4. Membro suplente da Comissão de Graduação do IFSC/USP, indicado pela Congregação do IFSC, em reunião do dia 28/10/2002.

Representação e Participação em Comissões Externas ao IFSC

 Prof. Dr. José Fernando Fontanari

1. Membro do Conselho de Pós-Graduação da USP.

2. Membro da Câmara Curricular do Conselho de Pós-Graduação da USP.

3. Membro da Comissão Central do Programa de Aperfeiçoamento de Ensino (PAE) da USP, Portaria do Reitor da USP – Port. GR 3.347.

 Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior

1. Membro do Conselho de Graduação da USP.

 Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

1. Pró-Reitor de Pesquisa da USP.
2. Membro do Conselho Diretor do Laboratório de Computação Científica da USP
3. Membro do Conselho Gestor de Museus da Pró-Reitoria de Cultura e Extensão Universitária da USP

 Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody

1. Representante do IFSC, Comissão de Graduação do ICMC, de 08/06/2000 a 07/06/2003.

 Prof. Dr. Roland Koberle

1. Comissão de Avaliação do programa PRONEX, área de Astronomia.

Participação em Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais**Congresso Internacional** **Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes**

1. Trends in Nanotechnology (TNT2002), com apresentação da palestra convidada "Controlling entangled electrons and spin-polarized currents in novel solid-state geometries", Santiago de Compostela, Espanha, 09 a 13 de setembro de 2002.
2. The Science and technology of spin transport in nanostructures (The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics), Miramare – Trieste, Itália, 19 a 26 de agosto de 2002.
3. Second international conference on the physics and applications of spin-related phenomena in semiconductors, com apresentação da palestra "Controlling spin entanglement and shot noise via the Rashba interaction", Würzburg, Alemanha, 23 a 26 de julho de 2002.
4. IV Gordon Conference on Magnetic Nanostructures, Barga, Itália, 12 a 17 de maio de 2002. Apresentação de postêres: i) Rashba spin-orbit interaction and shot noise for spin polarized and entangled electrons and ii) Universal spin-polarization fluctuations in wires with 1D wires with magnetic impurities.
5. Workshop Electrons in zero-dimensional conductors: Beyond the single-particle picture", Dresden (Alemanha), 18 a 22 de novembro de 2002.

 Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

1. 1º Congresso Internacional UNESCO/USP/ABRADIC/NJR de Divulgação Científica – Ética e Divulgação Científica: Os desafios do novo século, com apresentação do painel: "Divulgação científica e educação", São Paulo, SP, 28/08/2002.

 Prof. Dr. Roland Koberle

1. "School of Fundamentals and Perspectives on Nonlinear Dynamics", com apresentação da palestra: "The tongue of an invertebrate brain: experiments and analyses of neural systems", Universidade de Brasília, Centro Internacional de Física da Matéria Condensada, Brasília, DF, 01 a 05 de julho de 2002.

Congresso Nacional **Prof. Dr. Silvestre Ragusa**

1. XXIII Encontro Nacional de Partículas e Campos, Águas de Lindóia, SP, 14 a 19/10/2002.

Escola de Verão **Prof. Dr. Valter Luiz Libero**

1. Escola Brasileira de Mecânica Estatística, IFSC/USP, São Carlos, SP, de 18/02/2003 a 01/03/2003.

Outros (Seminários exterior, workshops, reuniões científicas) **Profa. Dra. Aguida Celina de Méo Barreiro**

1. Workshop "Novas Maneiras de Ensinar.... Novas Formas de Aprender", com o Educador Celso Antunes, UFSCAr, São Carlos, SP, 25/06/2002.

 Prof. Dr. José Fernando Fontanari

1. Workshop do PAE, Universidade de São Paulo, São Paulo, SP, 21/10/2002.

 Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior

1. Educar 2002 – Gestão em Qualidade - 9ª Feira Internacional de Educação, São Paulo, SP, 08 a 11/05/2002.
2. II Feira de Profissões da USP/Campi Interior, Piracicaba, SP, 26 a 28/07/2002.

 Prof. Dr. Silvestre Ragusa

1. I Workshop de Gravitação e Cosmologia, Instituto de Física Teórica, com apresentação do trabalho: "Equação de movimento numa teoria unificada na gravitação e eletromagnetismo", São Paulo, SP, 23 a 25/05/2002.
2. Semana da Física da Universidade Estadual de Maringá, Com apresentação da palestra: "Relatividade restrita: previsões e confirmação experimental", Maringá, PR, de 24 a 30/09/2002.

 Prof. Dr. Valter Luiz Libero

1. II Feira de Profissões da USP/Campi Interior, Piracicaba, SP, 26 a 28/07/2002.

Laboratório de Filmes Finos

ÍNDICE

GRUPO DE PESQUISA: LABORATÓRIO DE FILMES FINOS	163
A. PRINCIPAIS INDICADORES DE DESEMPENHO E OUTROS DADOS RELEVANTES	163
B. PRÊMIOS E DISTINÇÕES	163
C. ATIVIDADES DE PESQUISA	163
Recursos Humanos	163
Linhas de Pesquisa	164
Publicações	165
Recursos Financeiros – Projetos de Pesquisa	166
Bolsas Produtividade em Pesquisa	166
D. ATIVIDADES ACADÊMICAS E DE EXTENSÃO UNIVERSITÁRIA	166
Atividades Didáticas	166
Participação em Comissões Julgadoras no IFSC	166
Participação em Comissões Julgadoras Externas ao IFSC	167
Assessoria no Julgamento e Avaliação de Projetos	167
Representação e Participação em Comissões no IFSC	167
Participação em Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais	167
Atividades de Extensão	167

Grupo de Pesquisa: LABORATÓRIO DE FILMES FINOS**A. Principais Indicadores de Desempenho e Outros Dados Relevantes**

Em 2002 o Laboratório de Filmes Finos publicou 10 artigos em periódicos internacionais. Quatro destes foram fruto de participação em congressos internacionais da área (19th International Conference on Microcrystalline and Amorphous Semiconductors & 10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics). Além destes, apresentou, e teve seus resumos publicados, nos seguintes encontros nacionais: XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada e XV Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência de Materiais.

Para tornar possível o desenvolvimento das linhas de pesquisa s- PROPRIEDADES OPTO-ELETRÔNICAS DE FILMES FINOS e PROPRIEDADES ÓPTICAS, ELETRÔNICAS E ESTRUTURAIS DE MATERIAIS DE GAP GRANDE, ao longo do ano de 2002 foram implementados: um sistema para medidas de foto-luminescência na região do IR (800-1700 nm) com possibilidade de variação da temperatura (10-500 K) e, um sistema para realização de imagens e mapeamento Raman e de fotoluminescência.

B. Prêmios e Distinções**C. Atividades de Pesquisa**

Durante o período em questão foi dada continuidade ao estudo de propriedades ópticas, eletrônicas e estruturais em semicondutores amorfos ou micro-cristalinos. Os materiais em questão, sob a forma de filmes finos, foram preparados mediante a técnica de *sputtering* de rádio frequência. Após a deposição, os filmes foram submetidos a toda uma série de caracterizações envolvendo técnicas de espectroscopia óptica (foto-luminescência, espalhamento *Raman*, emissão e absorção óptica nas regiões do UV-VIS-IR, etc.), foto-emissão (x-ray photoelectron spectroscopy, *Auger*), microscopias eletrônica e de força atômica, *Rutherford* backscattering, etc. Dentre os diferentes compostos estudados, merecem destaque aqueles dopados com íons terras-raras. O estudo deste tipo de material vem ganhando grande interesse ao longo dos últimos anos, principalmente, devido às suas possíveis aplicações tecnológicas. Dentre elas destacam-se, por exemplo, a construção de dispositivos híbridos (capazes de realizar funções ópticas e elétricas) totalmente baseado na tecnologia do silício; a construção de dispositivos emissores de luz na região do IR e VIS; a confecção de guias de onda e amplificadores ópticos sob a forma planar; etc.

Merecem destaque, ainda, as pesquisas realizadas em cooperação com o *Paul-Drude Institute* (Berlim), na investigação de processos de cristalização induzida por radiação *laser* em estruturas do tipo a-Ge/GaAs, além do estudo sistemático de materiais de *band gap* grande (~ 5 eV). Mais recentemente, e ainda relativo ao estudo de novos materiais, demos início ao estudo de sistemas micro-estruturados baseados em compostos à base de Si, Ge, etc.

Recursos Humanos**Docentes**

3. Prof. Dr. Antonio Ricardo Zanatta, Professor Doutor - Coordenador do Laboratório de Filmes Finos, Doutor pela UNICAMP, Instituto de Física "Gleb Wataghin" (1995), Pós-Doutoramento pelo Instituto de Física de São Carlos, IFSC/USP (1996).

Administração

3. Suelli Paulina Sanchez Dotta - Secretária

Colaboradores Externos

- Prof. Dr. Ivan Chambouleayron- Laboratório de Pesquisas Fotovoltáicas (UNICAMP)
"Mecanismos de cristalização induzida por metais em filmes de a-Ge:H"
- Prof. Dr. Carlos Rettori- Laboratório de Propriedades Ópticas e Magnéticas (UNICAMP)
"Propriedades magnéticas de filmes de silício amorfo dopado com íons terras-raras"
- Prof. Dr. Fernando Alvarez- Laboratório de Pesquisas Fotovoltáicas (UNICAMP)
"Espectroscopia de fotoemissão em filmes semicondutores e dielétricos"
- Prof. Dr. Fernando Lázaro Freire Jr.- Laboratório van de Graaff (PUC- RJ)
"Estudos composicionais e estruturais de filmes finos"
- Prof. Dr. Marcelo Mulato- Laboratório de Bio-sensores e Materiais (FFCLRP- USP)
"Relief patterns produced by laser interference crystallization"
- Dr. Paulo Ventura Santos- Paul-Drude Institute (Berlin- Germany)
"Laser crystallization and structuring of a-Ge films on GaAs"
- Dr. Achim Trampert- Paul-Drude Institute (Berlin- Germany)
"Laser crystallization and structuring of a-Ge films on GaAs"
- Dr. Uwe Jahn- Paul-Drude Institute (Berlin- Germany)
"Electron microscopy studies of amorphous semiconductor films"
- Dr. Luiz Gustavo Jacobsohn- Los Alamos National Laboratory (Los Alamos- USA)

Linhas de Pesquisa

Título 1: "Propriedades opto-eletrônicas de filmes finos"

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Antonio Ricardo Zanatta – docente
- Dr. Cristina Ribeiro – Pós-doutoranda

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: Tem-se por objetivo principal a confecção de um dispositivo opto-eletrônico inteiramente baseado em semicondutores de estrutura amorfa ou micro-cristalina, dopados (ou não) com íons terra-rara ou com metais de transição. Por se tratar de uma área nova e de grande interesse, esta linha de pesquisa tem características tanto acadêmicas quanto tecnológicas. Neste sentido, resultados de investigação acadêmica continuamente re-alimentam e direcionam a metodologia de trabalho a fim de se alcançar o objetivo final. Mais recentemente, temos nos concentrado também no desenvolvimento e investigação destes compostos sob a forma micro-estruturada.

Resultados: Uma vez possível a confecção de um dispositivo opto-eletrônico, baseado em compostos de estrutura amorfa ou micro-cristalina, ter-se-á acesso, além do dispositivo propriamente dito, a uma enorme gama de informações de grande interesse tecnológico. A saber: processos e propriedades relevantes à obtenção de um dispositivo híbrido; fenomenologia de crescimento dos referidos compostos e estruturas eletrônicas; mecanismos de excitação e de recombinação de portadores; etc.

Título 2: "Propriedades ópticas, eletrônicas e estruturais de materiais de gap grande"

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Antonio Ricardo Zanatta – docente
- Dr. Cristina Ribeiro – Pós-doutoranda

Agência Financiadora: FAPESP

Objetivos: Tal linha de pesquisa destina-se ao estudo de novos materiais semicondutores e dielétricos, com gap óptico na região do VIS-UV, passíveis de aplicações tecnológicas. Inclui a preparação de amostras mediante a técnica de *sputtering* de rádio frequência, caracterização segundo diferentes técnicas experimentais (ópticas, eletrônicas, estruturais, etc.) e interpretação de resultados experimentais. Em função dos resultados obtidos pretende-se a construção de dispositivos opto-eletrônicos simples.

Resultados: Grande parte dos resultados está voltada à compreensão dos fenômenos físico-químicos relevantes na preparação e que determinam as propriedades opto-eletrônicas destes compostos. Compreende um trabalho, praticamente contínuo, de otimização e investigação de propriedades opto-eletrônicas. Atualmente, diz respeito a uma área de grande concentração em função de seu grande potencial para a obtenção de fontes de luz nas regiões do VIS e UV.

Publicações

Artigo Publicado em Periódico - Internacional

1. ZANATTA, A R; RIBEIRO, C T M; ALVAREZ, F; Comment on "Ion-assisted pulsed laser deposition of aluminum nitride thin films", Journal of Applied Physics 92, 6349 (2002).
2. JACOBSON, L G; CAPOTE, G; CRUZ, N C; ZANATTA, A R; FREIRE Jr, F L; "Plasma deposition of amorphous carbon films from CH₄ atmospheres highly diluted in Ar", Thin Solid Films 419, 46 (2002).
3. MULATO, M; ZANATTA, A R; TOET, D; CHAMBOULEYRON, I; "Optical diffraction gratings produced by laser interference structuring of amorphous germanium-nitrogen alloys", Applied Physics Letters 81, 2731 (2002).
4. RIBEIRO, C T M; ALVAREZ, F; ZANATTA, A R; "Structural properties of aluminum-nitrogen films prepared at low temperature", Applied Physics Letters 81, 1005 (2002).
5. RIBEIRO, C T M; ALVAREZ, F; ZANATTA, A R; "Red and green light emission from samarium-doped amorphous aluminum nitride films", Advanced Materials 14, 1154 (2002).
6. RIBEIRO, C T M; ZANATTA, A R; ALVAREZ, F; "X-ray photoelectron spectroscopy of amorphous AlN alloys prepared by reactive rf sputtering", Journal of Non-Crystalline Solids 299-302, 323 (2002).
7. CHAMBOULEYRON, I; FAJARDO, F; ZANATTA, A R; "Microscopic mechanisms behind the Al-induced crystallization of a-Ge:H films", Journal of Non-Crystalline Solids 299-302, 143 (2002).
8. SANTOS, P V; ZANATTA, A R; DONDEO, F; TRAMPERT, A; JAHN, U; COMEDI, D; PUDENZ, M A A; CHAMBOULEYRON, I; "Pulsed laser crystallization and structuring of a-Ge on GaAs", Journal of Non-Crystalline Solids 299-302, 137 (2002).
9. SANTOS, P V; ZANATTA, A R; JAHN, U; TRAMPERT, A; DONDEO, F; CHAMBOULEYRON, I; "Laser interference structuring of a-Ge films on GaAs", Journal of Applied Physics 91, 2916 (2002).
10. SERCHELI, M S; RETTORI, C; ZANATTA, A R; "Magnetic properties of gadolinium-doped amorphous silicon films", Brazilian Journal of Physics 32, 409 (2002).

Trabalhos Apresentados em Eventos – Anais/Proceedings

1. CONDELES, J F; MULATO, M; BRUNELLO, C A; MONTORO, L A; ROSOLEN, J M; ZANATTA, A R; "Thin films of PbI₂ produced by spray pyrolysis", Proceedings do XV Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência de Materiais (Natal- RN, 09-12 de novembro de 2002).
2. MAIA, L J Q; BERNARDI, M I B; ZANATTA, A R; MASTELARO, V R; "Caracterização microestrutural de pós obtidos pelo método Pechini modificado a partir do sistema ternário BaO-B₂O₃-TiO₂", Proceedings do XV Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência de Materiais (Natal- RN, 09-12 de novembro de 2002).

Trabalhos Apresentados em Eventos – Resumos

1. RIBEIRO, C T M; ALVAREZ, F; ZANATTA, A R; "Photoluminescence of Sm and Er doped amorphous AlN", in: XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, São Lourenço, 07-11 Maio 2002.
2. JACOBSON, L G; CAPOTE, G; FREIRE Jr, F L; ; ZANATTA, A R; CRUZ, N C; "Estudo dos efeitos da diluição da atmosfera precursora de metano por gases nobres na estrutura e propriedades mecânicas de filmes de carbono amorfo hidrogenado", in: XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, São Lourenço, 07-11 Maio 2002.

Recursos Financeiros – Projetos de Pesquisa

1. "PROPRIEDADES OPTO-ELETRÔNICAS DE FILMES FINOS", Prof.Dr. Antonio Ricardo Zanatta, Agência financiadora: FAPESP- Processo nº 2000/03603-8, Duração: 01/09/00 a 30/08/02 – valor concedido US\$ 121.000,00 e R\$ 54.117,25 (reserva técnica).

Participação como Colaborador (membro da equipe) em Projeto de Pesquisa

1. "CENTRO DE PESQUISAS EM ÓPTICA E FOTÔNICA", Agência financiadora FAPESP- CEPID. Coordenadores: Prof. V. Bagnato (IFSC) e C.H.B. Cruz (UNICAMP).

Bolsas Produtividade em Pesquisa

5. Prof. Dr. Antonio Ricardo Zanatta, Nível IIB, março 2002 a fevereiro 2004.

D. Atividades Acadêmicas e de Extensão Universitária

Atividades Didáticas

Graduação

 Prof. Dr. Antonio Ricardo Zanatta

8. SLC 549 – Física II (teoria), 1º e 2º sem, 75 h

9. SLC 555 – Física III (laboratório), 1º e 2º sem, 75 h

Participação em Comissões Julgadoras no IFSC

Tese de Doutorado

 **Prof. Dr. Antonio Ricardo Zanatta**

1. Washington Luiz Esteves Magalhães, "Deposição de filmes protetores sobre madeira pela técnica do plasma frio", Suplente, 12/08/2002.

Dissertação de Mestrado

 **Prof. Dr. Antonio Ricardo Zanatta**

1. Paulo Licêncio Frazen, "Propriedades ópticas não-lineares de oligômeros de anilina", Suplente, 29/10/2002.

Exame de Qualificação

 **Prof. Dr. Antonio Ricardo Zanatta**

1. Luis Humberto da Cunha Andrade, "Optical transition properties of the Nd³⁺ ion in Gd_{0.8}La_{0.2}VO₄ crystal", Doutorado, 19/12/2002.
2. Valtencir Zucolotto, "The influence of electrostatic and H-bonding interactions on the optical storage of layer-by-layer films of an azopolymer", Doutorado, 13/12/2002.

Participação em Comissões Julgadoras Externas ao IFSC

Tese de Doutorado

 **Prof. Dr. Antonio Ricardo Zanatta**

1. Maurício da Silva Sercheli, "Propriedades magnéticas de semicondutores amorfos dopados com terras-raras a-SiRE:H e de grafites pirolíticos altamente orientados HOPG", UNICAMP, Suplente, 12/12/2002.

Assessoria no Julgamento e Avaliação de Projetos

 **Prof. Dr. Antonio Ricardo Zanatta**

Consultor ad-hoc CNPq – diversos pareceres.

Representação e Participação em Comissões no IFSC

 **Prof. Dr. Antonio Ricardo Zanatta**

1. Membro Suplente da Congregação do IFSC.
2. Membro Suplente do Conselho Departamental, eleito Titular em Outubro de 2002 – CD FFI.
3. Membro Suplente junto à Comissão Coordenadora do Curso de Licenciatura em Ciências.
4. Membro Titular junto à Comissão Coordenadora do Curso de Engenharia Elétrica da EESC.

Participação em Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais

Congresso Nacional

1. XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, São Lourenço, 07-11 Maio 2002.

Outros

1. Árbitro do Applied Physics Letters
2. Árbitro do Journal of Applied Physics
3. Árbitro do Advanced Materials
4. Árbitro do Thin Solid Films
5. Árbitro do Diamond and Related Materials.

Atividades de Extensão

1. "Técnicas para análise de superfícies- Princípios e aplicações" - Mini-curso (~ 5h) ministrado na empresa BOC Edwards do Brasil (23 e 24 de janeiro de 2002).

Instrumentação e Informática

INDICE

GRUPO DE PESQUISA: INSTRUMENTAÇÃO E INFORMÁTICA 170**A. PRINCIPAIS INDICADORES DE DESEMPENHO E OUTROS DADOS RELEVANTES 170****B. PRÊMIOS E DISTINÇÕES 170****C. ATIVIDADES DE PESQUISA 170****Recursos Humanos 171****Linhas de Pesquisa 172****Publicações 176****Recursos Financeiros – Projetos de Pesquisa 180****Bolsas Produtividade em Pesquisa 181****D. ATIVIDADES ACADÊMICAS E DE EXTENSÃO UNIVERSITÁRIA 181****Atividades Didáticas 181****Orientação Acadêmica e Bolsistas 182****Teses e Dissertações Concluídas por Docentes e Alunos 184****Participação em Comissões Julgadoras no IFSC 185****Participação em Comissões Julgadoras Externas ao IFSC 186****Assessoria no Julgamento e Avaliação de Projetos 186****Responsabilidade de Docentes do FFI no Setor de Infra-Estrutura do IFSC 187****Representação e Participação em Comissões no IFSC 187****Participação em Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais 187****Grupo de Pesquisa: INSTRUMENTAÇÃO E INFORMÁTICA****A. Principais Indicadores de Desempenho e Outros Dados Relevantes****Prof. Dr. Carlos Antonio Ruggiero**

Desenvolvimento de Projeto e implantação de redes de cooperativas de alta velocidade. Orientação de diversos trabalhos na área. Orientação de trabalhos em Arquiteturas de Alto Desempenho. Participação na Comissão Assessora do projeto TIDIA da FAPESP que visa estimular a pesquisa e desenvolvimento tecnológico na área de Internet.

Prof. Dr. Gonzalo Travieso

Desenvolvimento de trabalhos na área de técnicas e ferramentas para programação paralela, e na área de aplicações de processamento paralelo em física.

Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi

Orientação de estudantes de iniciação científica nas áreas de física de semicondutores e de computação paralela aplicada. Dois trabalhos publicados em revistas internacionais com árbitro. Participação em bancas de examinadoras de doutorado, exames de qualificação e comissões julgadoras de processos seletivos. Apresentação de trabalhos em congressos nacionais de física computacional e de semicondutores e em congresso internacional de física da matéria condensada. Reestruturação do laboratório didático de computação.

Prof. Dr. Jan Frans Willen Slaets

Orientação na área de trabalhos sistemas paralelos. Responsável pelo Serviço de Informática do IFSC. Coordenação do desenvolvimento de Instrumentação Eletrônica para o Diptelab. Coordenador das Atividades ligadas a Assistência Técnica Administrativa (ATAd) e Assistência Técnica Financeira (ATFn).

Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa

Diversas publicações internacionais, incluindo Journal of Comparative Neurology e Trends in Neuroscience. Diversas publicações internacionais, incluindo Journal of Comparative Neurology e Trends in Neuroscience. Orientação e conclusão em Mestrados e Doutorado. Presidente das Comissões Organizadoras e de Programa de diversos eventos em áreas relacionadas. Avaliador para diversas revistas e congressos internacionais. Diversas apresentações e tutoriais convidados a nível nacional e internacional. Menção Honrosa (categoria Iniciação Científica, orientador de Edson Tadeu Monteiro Manoel) no 8º Simpósio Internacional de Iniciação Científica, Universidade de São Paulo, Julho/2000. Trabalho selecionado pela Pró-Reitoria de Pesquisa da USP para apresentação na Rutgers University, EUA, em abril de 2002.

B. Prêmios e Distinções**C. Atividades de Pesquisa****Prof. Dr. Carlos Antônio Ruggiero**

Os trabalhos desenvolvidos englobam técnicas para redes cooperativas de alta velocidade, bem como chaveamento e servidores de acesso. Sistemas de segurança de redes corporativas, servidores de nomes, gerenciamento em Redes ATM baseados nos padrões TACACS e RADIUS e sistemas de monitoração de tráfego de rede, são também estudados. Utilizando os sistemas operacionais de domínio público como Linux e o FreeBSD, com plataforma de pesquisa e desenvolvimento. Desenvolvimento de novas ferramentas para ensino nas disciplinas de Redes de Computadores e Arquiteturas de Computadores II.

Membro da Comissão Assessora (Prof. Perez) quanto aos projetos especiais ANSP (Academic Network of São Paulo) que gere a infra-estrutura de redes do Estado de São Paulo e TIDIA (Tecnologia de Informática no Desenvolvimento da Internet Avançada), aprovado em fevereiro de 2001 pelo Conselho Superior, que visa estimular a pesquisa e desenvolvimento da Internet.

Gerenciamento dinâmico de tráfego multimídia em redes híbridas ATM e Ethernet.

Desenvolvimento e avaliação de uma metodologia realista que permita que computadores de uma rede local (LAN) equipados com interfaces de rede Ethernet possam usufruir parâmetros de Qualidade de Serviço oferecidos por uma rede ATM de grande abrangência geográfica (WAN) à qual não estão diretamente conectados. Para isto serão pesquisadas, desenvolvidas e avaliadas novas técnicas de gerenciamento dinâmico de conexões ATM que permitam a transmissão eficiente de voz e vídeo com garantia de qualidade através de WANs. Os resultados poderão ser utilizados para operação viabilizar a operação remoto do Tomográfico de RM desenvolvido no IFSC.

Prof. Dr. Gonzalo Travieso e Prof. Dr. Jan Frans Willen Slaets

Foram desenvolvidas atividades nas áreas de aplicações de processamento paralelo e ferramentas para programação paralela. Em aplicações, trabalhou-se no desenvolvimento de um programa paralelo para cálculos de propriedades de metais com impurezas magnéticas a cooperação com o Prof. Guilherme M. Sipahi na parcerização de um programa para cálculos de propriedades de semicondutores por métodos de autoconsistência Na área de ferramentas foram desenvolvidos trabalhos em um sistema de objetos distribuídas para alta disponibilidade em clusters, uma biblioteca para tolerância a falhas de sistemas paralelos e uma ferramenta de previsão de desempenho de programas paralelos.

Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi

Foram estudados os seguintes sistemas semicondutores utilizando o método k.p: a) heteroestruturas semicondutoras compostas por materiais III-V (GaAs, AlAs, InAs e ligas na fase cúbica), III-N (GaIn, AlIn, InN e ligas nas fases cúbica e hexagonal) crescidas em diferentes direções e dopadas tipo p e tipo n; b) heteroestruturas semicondutoras compostas por alguns dos materiais citados acima e ligas GaAsN; c) heteroestruturas semicondutoras compostas por alguns dos materiais citados acima e ligas de materiais magnéticos diluídos (tais como GaMnAs); d) materiais baseados em Si; e) poços delta-doping em diversos materiais.

Alguns dos algoritmos utilizados para estes estudos foram rescritos para fazer uso de computação paralela, melhorando sua performance e permitindo o cálculo de sistemas mais complexos.

Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa

Continuação das linhas de pesquisas anteriores, incluindo às atividades de aplicação de métodos "level-set" para solução de equações diferenciais parciais e cálculo de curvatura e representações multi-escala; modelos baseados em processamento de sinais e estatística para a modulação da resposta cardíaca de aranhas saltadoras em resposta a estímulos visuais; desenvolvimento e comparação de técnicas de esqueletonização multi-escala baseadas em dilatações exatas; avanços em análise de formas biológicas e neuromorfometria; desenvolvimento de técnicas mais

eficientes para determinação de dendrogramas; projeto e implementação de um laboratório para análise de imagens, com aplicação e resultados na modelagem da percepção de complexidade pictórica por humanos e obtenção de curvas de calibração para métodos de estimação de curvatura baseados em transformadas wavelet; integração de segmentação de imagens por cores e visão estereoa; desenvolvimento de protocolos para processamento distribuído em sistemas de microcomputadores IBM-PC compatíveis e aplicação no sistema Cyvis-1 para visão versátil; classificação de células neurais com base em diversas neuromorfométricas novas, desenvolvimento de modelos e ambientes de desenvolvimento para simulação e modelagem eletrofisiológica. Pesquisa em bioinformática e neuroinformática.

Recursos Humanos

Docentes

1. **Prof. Dr. Jan Frans Willem Slaets**, Coordenador do Grupo de Instrumentação Informática, Doutor pela Universidade de São Paulo, São Paulo-SP (1979), Livre-docente pela Universidade de São Paulo (1985), Professor Titular.
2. **Prof. Dr. Carlos Antonio Ruggiero**, Doutor pela University of Manchester, Inglaterra (1987). Professor Doutor.
3. **Prof. Dr. Gonzalo Travieso**, Doutor pela Universidade de São Paulo, IFSC/USP, São Carlos (1993). Professor Doutor.
4. **Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi**, Doutor pela Universidade de São Paulo, IFUSP/USP, São Paulo (2001). Professor Doutor.
5. **Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa**, Coordenador do Grupo de Visão Cibernética, Doutor pela University of London, Londres (1992), Livre-docente pela Universidade de São Paulo (1997), Professor Associado.

Técnicos

1. Ailton Batista Alves - Técnico em Eletrônica
2. Ivanilda Helena Zucolotto de Stefani - Técnico em Eletrônica
3. Lírio Onofre Baptista de Almeida - Técnico em Eletrônica
4. Marcos Roberto Gonçalves - Técnico em Eletrônica
5. Leandro Carlos Pedrassolli - Técnico Especialista em Laboratório, desde 09/05/2002.

Administração

1. Sueli Paulina Sanchez – Secretária

Colaboradores Externos

- Profa. Dra. Patrícia Magna (Colaboradora)
- Prof. Dr. Ulysses Borelli Thomaz Junior (AFA – Pirassununga)
- Prof. Dr. Roberto Marcondes Cesar Junior (IME – USP)
- Prof. Dr. Roberto de Alencar Lotufo, (DCC – UNICAMP)
- Prof. Dr. Nilceu Aparecido Marana (UNESP – Bauru)
- Dr. James Sethian (Universidade da Califórnia)
- Dr. Vito de Gesù (Itália)

Linhas de Pesquisa

Título 1: "Computação de Alto Desempenho."

Pessoal envolvido:

- Prof. Dr. Jan F. W. Slaets (Docente FFI-IFSC)
- Prof. Dr. Gonzalo Travieso (Docente FFI-IFSC)
- Claudio Roberto de Vincenzi (Doutorado)
- Elaine Patricia Quaresma Xavier (Mestrado)
- André Muezerie (Doutorado)
- Eloiza Helena Sonoda (Doutorado)
- Francisco Aparecido Rodrigues (Iniciação Científica)

Objetivos: Desenvolver e avaliar técnicas e ferramentas para processamento paralelo, principalmente com vistas à sua aplicação em problemas numericamente intensivos de física. Procuramos aproveitar a disponibilidade de computadores pessoais e sistemas de interconexão de baixo custo, para formar um sistema paralelo a ser utilizado nas aplicações, enfatizando então o desenvolvimento de aplicações e de ferramentas para auxiliar o uso e administração desses sistemas.

Resultados: Foi concluído o desenvolvimento de um sistema de avaliação de desempenho de sistemas paralelos baseada em simulação usando descrição simplificada do programa e da arquitetura, resultando em uma dissertação de mestrado. Concluímos também uma versão paralela de um programa para cálculo de espectros de luminescência de semicondutores, paralelizando essa baseada na distribuição dos pontos da rede do semicondutor. Começamos também um trabalho extensivo de desenvolvimento de um sistema orientado a objetos para apoio à programação de sistemas paralelos para computações científicas.

Também foi dada continuidade aos trabalhos de tolerância a falhas para sistemas paralelos, um sistema de alta disponibilidade para clusters e uma interface para a utilização de clusters.

Título 2: "Visão Cibernética."

Pessoal envolvido:

- Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa (Coordenador do GPVC)
- Prof. Roberto Marcondes Cesar Junior (IME-USP)
- Prof. Odemir Martinez Bruno (ICMC-USP)
- Leandro Farias Estrozi (Doutorado)
- Felipe Miney Gonçalves da Costa (Doutorado)
- Edson Nakamura (Doutorado)
- Daniela Mayumi Ushiszya (Doutorado)

Agências Financiadoras: Fapesp, CNPq.

Objetivos e Resultados: Desenvolvimento de instrumentação para eletrofisiologia.

Aperfeiçoamentos no sistema para captação de micromovimentos, utilizando sensores de efeito Hall, que vem sendo utilizado em experimentos eletrofisiológicos de forma a se correlacionar a atividade neural registrada com outras características fisiológicas de aranhas saltadoras. Calibração da resposta elétrica a micromovimentos.

Estudo e simulação do sistema de visão da aranha saltadora: Experimentos psicofísicos utilizando estímulos gerados por computação gráfica têm sido realizados com a finalidade da caracterização do sistema de visão da aranha saltadora (Salticidae). Princípios deste sistema, que possuem estreito relacionamento com a transformada de Hough e reconstrução tomográfica por retroprojeção, têm sido utilizados na construção de uma câmera de vídeo que, embora operando apenas com um único foto-receptor, deverá ser capaz de produzir representações dos elementos em imagens em termos de segmentos de retas. Um protótipo eletromecânico foi desenvolvido e avaliado com sucesso, incluindo o uso de "simulated annealing" e algoritmos genéticos para o controle de janelas em forma de bastão e escolha de parâmetros. Estamos também realizando a monitoração da resposta das aranhas saltadoras a estímulos visuais utilizando o medidor de micromovimentos comentado acima. Desenvolvimento de modelos utilizando processamento de sinais determinístico e estatístico para a modulação do batimento cardíaco em resposta a estímulos visuais.

Estudos psicofísicos em atenção seletiva e percepção visual: Uso do sistema Synergos, que inclui Internet, sistemas distribuídos, "data mining", inteligência artificial, entre outros conceitos, para estudo de percepção visual e construção de modelos matemático-computacionais para modelagem de percepção visual humana. Resultados obtidos incluem a identificação de 8 "features" capazes de caracterizar com boa precisão a avaliação humana à complexidade pictórica.

Título 3: "Síntese, Simulação e Análise de Estruturas Neurais Biologicamente Realistas."

Pessoal envolvido:

- Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa (Coordenador do GPVC)
- Edson Koiti Nakamura (Doutorado)
- Andréa Gomes Campos (Doutorado)

Agências Financiadoras: Fapesp, CNPq.

Objetivos: Síntese, Simulação e Análise de Estruturas Neurais Biologicamente Realistas.

Resultados: Avanços no crescimento de células neurais 3D. Uso de conceitos de geometria diferencial para representação das estruturas dendríticas, crescimento "em paralelo" de arborizações dendríticas em 2D e 3D, modelagem e síntese de células piramidais 3D, visualização de células neurais 3D (colaboração com a Profa. Dra. Maria Cristina Ferreira de Oliveira, ICMSC-USP). Uso de matrizes esparsas na modelagem da dinâmica neural. Desenvolvimento de ambiente para modelagem e simulação eletrofisiológica em Delphi.

Construção de modelos para crescimento de estruturas neurais utilizando-se equações diferenciais parciais. Caracterização e classificação de células neurais 3D (colaboração com Dr. Toby Velte, Universidade de Minnesota, EUA).

Título 4: "Sistema de Visão CYVIS-1."

Pessoal envolvido:

- Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa (Coordenador do GPVC)
- Prof. Odemir Martinez Bruno (ICMC-USP)
- Andréa Gomes Campos (Doutorado)
- Silvia Cristina Dias Pinto (Doutorado)
- Carlos Alberto Rodrigues (Doutorado)
- Felipe Miney Gonçalves Costa (Doutorado)

Agências Financiadoras: Fapesp, CNPq.

Objetivos: Desenvolvimento, implementação, validação e aplicação de um sistema versátil para visão computacional baseado em uma série de "insights" de visão biológica.

Resultados: Obtenção de resultados e comparações na integração entre segmentação de imagens por cor e visão estéreo. Desenvolvimento de sistema para reconhecimento de sólidos baseado em modelos. Integração de uma cabeça de robô (Helpmate) no sistema Cyvis-1. Desenvolvimento de novas técnicas para eskeletonização a serem usadas em análise de formas. Comparação de estimação de curvatura usando diferenças finitas e "level-sets" e métodos de estimação baseados em transformadas wavelets (colaboração com Prof. James Sethian, Univ. California at Berkeley, EUA).

Título 5: "Sistemas de Inspeção Visual Gráfico-Interativos."

Pessoal envolvido:

- Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa (Coordenador do GPVC)
- Andréa Gomes Campos (Doutorado)

Agências Financiadoras: Fapesp, CNPq.

Objetivos: Desenvolvimento de aplicativos gráfico-iterativos em Delphi-Windows para aplicações diversas em inspeção visual.

Resultados: Implementação e validação de diversas técnicas de processamento e análise de imagens em Delphi. Sistemas foram desenvolvidos e aplicado, em colaboração com outras instituições, para análise de eletroforese e células musculares do rato. Início de tratamento de imagens de cristais de açúcar e produção em usinas açucareiras. Estudo e caracterização de cristais de KCl (colaboração com Prof. Dr. Máximo Siu-Li, IFSC-USP) e cristais de solo (colaboração com Prof. Dr. Peter Smart, Universidade de Glasgow, Reino Unido).

Título 6: "Redes de Alta Velocidade e Redes Corporativas."

Pessoal envolvido:

- Prof. Dr. Carlos Antonio Ruggiero (Docente FFI-IFSC)
- Prof. Dr. Jan Frans Willem Slaets (Docente FFI-IFSC)
- Profa. Dra. Patrícia Magna (Colaboradora)
- André de Angelis (Doutorado)
- André Muezerie (Doutorado)

Objetivos e Resultados: Desenvolver tecnologia para a implantação de redes corporativas de alta velocidade baseados em protocolos tais como: ATM, Fibre Channel e Frame Relay, especialmente em intranets com requerimentos específicos e conflitantes, tais como alta dispersão, topologias não usuais, segurança reforçada e *cost sensitive networks*. As atividades em andamento incluem:

1. Desenvolvimento de sistemas de monitoração de tráfego em redes, gerando insumos para a especificação de um modelo de precificação e tarifação baseado em leilão em tempo real. Há dois trabalhos em andamento nessa atividade, um baseado na alteração do pacote de domínio público Netramet (que implementa a arquitetura definida para monitoração de redes) e um trabalho baseado em extração em tempo real das variáveis contadoras de tráfego do kernel do FreeBSD e exibição através de gráficos sob WWW;
2. Desenvolvimento de simulador para chave em uma nova arquitetura de chave ATM;
3. Estudo de implementação de técnicas de Multicast em chaves ATM, trata-se de estudo em mecanismos de duplicação de células em chaves ATM. Um simulador está sendo desenvolvido para avaliar o desempenho da nova arquitetura proposta;
4. Gerenciamento dinâmico de tráfego multimídia em redes híbridas ATM e Ethernet: Desenvolvimento e avaliação de uma metodologia realista que permita que computadores de uma rede local (LAN) equipados com interfaces de rede Ethernet possam usufruir de parâmetros de Qualidade de Serviço oferecidos por uma rede ATM de grande abrangência geográfica (WAN) à qual não estão diretamente conectados. Para isto serão pesquisadas, desenvolvidas e avaliadas novas técnicas de gerenciamento dinâmico de conexões ATM que permitam a transmissão eficiente de voz e vídeo com garantia de qualidade através de WANs.

Os resultados poderão ser utilizados para operação viabilizar a operação remota do Tomógrafo de RM desenvolvido no IFSC.

Título 7: "Mecanismos de Policiamento de Tráfego em Chaves ATM."

Pessoal envolvido:

- Profa. Dra. Patrícia Magna (Colaboradora)
- Michelle Miranda Pereira (Mestrado)

Objetivos: Utilização da experiência adquirida com as arquiteturas baseadas no modelo a fluxo de dados no desenvolvimento de um novo mecanismo de policiamento de tráfego em chaves ATM.

Esse novo mecanismo deve atender aos requisitos envolvidos com conceito de qualidade de serviço (QoS) implementados em chaves ATM. Além disso, deve ser eficiente para os vários tipos de transmissão requerido pelas diversas aplicações que utilizam uma rede de computadores.

Título 8: "Estrutura eletrônica de semicondutores"

Pessoal envolvido:

- Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi (Docente FFI/IFSC)
- Dra. Sara Cristina Pinto Rodrigues (Pós-Doutoramento)
- Marcos Fábios Martins (Iniciação Científica)
- Marcel Nogueira d'Eurydice (Iniciação Científica)

Objetivos: Desenvolvimento de novos modelos, teóricos e computacionais, que descrevam as propriedades óticas e eletrônicas de estruturas semicondutoras. Além do avanço do entendimento teórico, este trabalho se propõe a auxiliar o trabalho de grupos que desenvolvam novos dispositivos semicondutores no estudo e caracterização destes. Entre os efeitos modelados encontram-se os seguintes: tensionamento da rede, muitos corpos, excitônicos e potenciais magnéticos em semicondutores magnéticos diluídos.

Resultados: Publicações em periódicos com árbitros e apresentação de trabalhos em congressos científicos.

Título 9: "Simulações Computacionais em Física de Estado Sólido"

Pessoal envolvido:

- Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi (Docente FFI/IFSC)
- Dra. Sara Cristina Pinto Rodrigues (Pós-Doutoramento)
- Adriano Batista Prieto (Iniciação Científica)
- Marcel Nogueira d'Eurydice (Iniciação Científica)
- Marcos Fábios Martins (Iniciação Científica)

Objetivos e Resultados: Desenvolvimento e otimização de algoritmos computacionais visando a simulação de propriedades eletrônicas e óticas de dispositivos semicondutores.

Entre os métodos utilizados encontram-se a programação sequencial em Fortran e paralela distribuída utilizando Fortran90/MPI e HPF. Outras ferramentas (tais como linguagens scripting) são também utilizadas no desenvolvimento de interfaces para os programas desenvolvidos, visando a simplificação de seu uso.

Publicações

Artigo de Periódico – Internacional

- KOHLER, U.; A.S., D. J.; POTTHAST, S.; KHARTCHENKO, A.; LISCHKA, K.; NORIEGA, O. C.; MENESES, E. A.; TABATA, A.; RODRIGUES, S. C. P.; SCOLFARO, L. M. R.; SIPAHI, G. M.; LEITE, J. R. Optical characterization of cubic AlGaIn/GaN quantum wells. *Phys. Stat. Sol. A, Weinheim*, vol. 192, n. 1, p. 129-134, Jul. 2002. Fator de impacto: 01.035
- RODRIGUES, S. C. P.; SIPAHI, G. M.; SCOLFARO, L. M. R.; NORIEGA, O. C.; LEITE, J. R.; FREY, T.; AS, D. J.; SCHIKORA, D.; LISCHKA, K. Inter- and intraband transitions in cubic nitride quantum wells. *Phys. Stat. Sol. A, Weinheim*, vol. 190, n. 1, p. 121-127, Mar. 2002. Fator de impacto: 01.035
- RODRIGUES, S. C. P.; SIPAHI, G. M. Calculations of electronic and optical properties in p-doped AlGaIn/GaN superlattices and quantum wells. *J. Cryst. Growth, Amsterdam*, vol. 246, n. 3-4, p. 347-354, Dec. 2002. Fator de impacto: 01.375
- RODRIGUES, S. C. P.; SCOLFARO, L. M. R.; SIPAHI, G. M.; NORIEGA, O. C.; LEITE, J. R. K center dot p calculations of electronic and optical properties of p-doped (001) AlGaIn/GaN thin superlattices. *Phys. Stat. Sol. B, Weinheim*, vol. 234, n. 3, p. 906-910, Dec. 2002. Fator de impacto: 00.746
- RODRIGUES, S. C. P.; SIPAHI, G. M.; SCOLFARO, L. M. R.; LEITE, J. R. Hole charge localization and band structures of p-doped GaIn/GaN and GaAs/InGaAs semiconductor heterostructures. *J. Phys.: Condens. Matter, Bristol*, vol. 14, n. 23, p. 5813-5827, Jun. 2002. Fator de impacto: 01.608
- M. S. BARBOSA, L. da F. COSTA e E. S. BERNARDES. 2003: Neuromorphometric characterization with shape functionals. *Aceito Phys. Rev. E, APS*.
- L. da F. COSTA, M. S. BARBOSA, V. COUPEZ and D. STAUFFER. 2003: Morphological Hopfield Networks. *Accepted. Aceito para Brain and Mind, Kluwer*.
- D. STAUFFER, A. AHARONY, L. da F. COSTA, e J. ADLER: Efficient Hopfield pattern recognition on a scale-free neural network *Eur. Phys. J. B 32 (2003) 3*, 395-399
- BELETTI, M.E. e COSTA, L.F. – “A systematic approach to multi-species sperm morphological characterization”. *Anal Quant Cytol Hirtol*, vol.25 (2):97-107, 2003.
- COELHO, R. C.; COSTA, L. F. Realistic neuromorphic models and their application to neural reorganization simulations. *Neurocomputing, Amsterdam*, vol. 48, p. 555-571, Oct 2002. Fator de impacto: 00.636
- COSTA, L. F. Estimating derivatives and curvature of open curves. *Pattern Recognition, Kidlington*, vol. 35, n. 11, p. 2445-2451, Nov. 2002. Indexado no Science Citation Index. Fator de impacto: 01.077
- SOUZA, N. C.; RODRIGUES, C. A.; COSTA, L. F.; OLIVEIRA Jr., O. N. Statistical characterization of morphological features of layer-by-layer polymer films using image analysis. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology, in press*, 2003.
- SOUZA, N. C.; RODRIGUES, C. A.; COSTA, L. F.; OLIVEIRA Jr., O. N.; SILVA, J. R.; GIACOMETTI, J. A. Adsorption processes in layer-by-layer films of poly(o-methoxyaniline): the role of aggregation, *Thin Solid Films*, in press, 2003.
- SOUZA, N. C.; RODRIGUES, C. A.; COSTA, L. F.; OLIVEIRA Jr., O. N.; SILVA, J. R.; HERNANDES, A. C.; GIACOMETTI, J. A. Diffusion-controlled growth of aggregates in layer-by-layer films of poly(o-methoxyaniline), *Synthetic Metals*, in press, 2003;
- COSTA, L. F.; MANOEL, E. T. M.; FAUCEREAU, F.; CHELLY, J.; VAN PELT, J.; RAMAKERS, G. A shape analysis framework for neuromorphometry. *Network: Comput. Neural Syst., Bristol*, vol. 13, n. 3, p. 283-310, Aug 2002. Fator de impacto: 00.836
- FALCAO, A. X.; COSTA, L. F.; CUNHA, B. S. Multiscale skeletons by image foresting transform and its application to neuromorphometry. *Pattern Recognition, Kidlington*, vol. 35, n. 7, p. 1571-1582, Jul. 2002. Fator de impacto: 01.077
- HOMEM, M. R. P.; MASCARENHAS, N. D. A.; COSTA, L. F.; PREZA, C. Biological image restoration in optical-sectioning microscopy using prototype image constraints. *Real-Time Imaging, London*, vol. 8, n. 6, p. 475-490, Dec. 2002. Fator de impacto: 00.303.
- COSTA, L.F. Reunifying Biology. *Bioinformatics Today and Tomorrow, Pharmatech*, pags.: 102-104, 2002.
- COSTA, L.F.; BELMONTE, J.C.I. Special Issue: Imaging in Bioinformatics. *Real Time Imaging*, vol. 8: 173-174, 2002.
- COSTA, L.F.; MANOEL, E.T.M. A Percolation Approach to Neural Morphometry and Connectivity. *Neuroinformatics*, vol. 1: 65-89, 2002.

Artigo de Periódico Nacional

- COSTA, L.F.; BIANCHI, A.G.C. A Outra Dimensão da Dimensão Fractal. *Ciência Hoje*, vol. 31(183): 40-47, Jun, 2002.

Edições Especiais Coordenadas

- COSTA, L. da F.; BELMONTE, J. C. I. Special Issue: Imaging in Bioinformatics. *Real-Time Imaging, London*, vol. 8, n. 3, p. 173-174, Jun. 2002.
- COSTA, L. F.; MERIAUDEAU, F. Editorial. *EURASIP J. Appl. Signal Process., Cuyahoga Falls*, vol. 7, p. 647-648, 2002.

Artigos Submetidos

- M. S. BARBOSA, L. da F. COSTA, E. S. BERNARDES, G. RAMAKERS and J. VAN PELT. 2003: Additive shape functionals as multi-scale neuromorphometric descriptors. Submitted to *Pattern Recognition*, Elsevier.
- COSTA, L. da F.; BARBOSA, M. S. e COUPEZ, V., 2003: A direct approach to neuronal connectivity. Submitted to *Network: Comput. Neural Syst.*

Trabalho de Evento – Internacional

- COSTA, L. F. Signal processing bioinformatics. In: *International Conference on Digital Signal Processing*, 14, Santorini, Greece, 2002. *Proceedings. Santorini, IEEE*, 2002. p. 23-27.
- PINTO, S. C. D.; CESAR JR, R. M.; GOKCAY, D.; COSTA, L. F. 3D morphological analysis of brain MRI using wavelets. In: *International Conference on Digital Signal Processing*, 14, Santorini, Greece, 2002. *Proceedings. Santorini, IEEE*, 2002. p. 399-401.
- SABINO, D. M. U.; NAKAMURA, E. K.; COSTA, L. F.; CALADO, R. T.; ZAGO, M. A. Chromatin texture characterization using multiscale fractal dimension. In: *International Conference on Digital Signal Processing*, 14, Santorini-Greece, 2002. *Proceedings. Santorini, IEEE*, 2002. p.529-533.
- TORRES, R. S.; FALCAO, A. X.; COSTA, L. F. Shape description by image foresting transform. In: *International Conference on Digital Signal Processing*, 14, Santorini, Greece, 2002. *Proceedings. Santorini, IEEE*, 2002. p. 1089-1092.

Trabalho de Evento-Resumo – Nacional

- RODRIGUES, S. C. P.; SIPAHI, G. M.; SCOLFARO, L. M. R.; LEITE, J. R. Electronic and optical properties of p-doped hexagonal nitrides. In: *Encontro Nacional de Física da Materia Condensada*, 25, Caxambu, 2002. *Resumos. Caxambu, SBF*, 2002. p.455-456.
- SIPAHI, G. M.; TRAVIESO, G. Simulating semiconductor spectra emissions in a PC cluster. In: *SBAC-PAD 2002 - SYMPOSIUM ON COMPUTER ARCHITECTURE AND HIGH PERFORMANCE*, 2002, Vitória/ES. 2002.
- SIPAHI, G. M.; TRAVIESO, G. Simulating semiconductor spectra emissions in a PC cluster. In: *14TH SYMPOSIUM ON COMPUTER ARCHITECTURE AND HIGH PERFORMANCE COMPUTING*, 2002, Vitória-ES. *Proceedings IEEE Computer Society Press*. 2002. p. 39-43.
- RODRIGUES, S. C. P.; SIPAHI, G. M.; SCOLFARO, L. M. R.; LEITE, J. R. Theoretical luminescence spectra determination in GaAs/GaAs quantum wells. In: *Encontro da Sociedade Brasileira de Pesquisa em Materiais*, 1, Rio de Janeiro, 2002. *Programa e resumos. Rio de Janeiro, SBPMat*, 2002. p. 133.
- SIPAHI, G. M.; RODRIGUES, S. C. P.; NORIEGA, O. C.; SCOLFARO, L. M. R.; LEITE, J. R.; FREY, T.; LISCHKA, K. Interband transitions in cubic AlGaIn/GaN quantum wells. In: *Encontro Nacional de Física da Materia Condensada*, 25, Caxambu, 2002. *Resumos. Caxambu, SBF*, 2002. p.475-476.
- PIOLA, T. F.; TRAVIESO, G. Avaliação de desempenho de sistemas paralelos baseada em descrição simplificada do programa e da arquitetura. In: *Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC*, 6, São Carlos, 2002. *Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP*, 2002. 1 p.
- RODRIGUES, F. A.; TRAVIESO, G. Técnicas de processamento paralelo para programas científicos. In: *Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC*, 6, São Carlos, 2002. *Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP*, 2002. 1 p.
- SONODA, E.; TRAVIESO, G. Um framework de classes para processamento paralelo. In: *Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC*, 6, São Carlos, 2002. *Resumos. São Carlos*,

Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.

9. ZEM, J L; TRAVIESO, G. Interface de programação para sistemas paralelos tolerantes a falha. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
10. BOAS, P R V. Subistema e interface de programação para balanceamento de cargas em um cluster de computadores. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
11. MUEZERIE, A; SLAETS, J F W. Gerenciamento dinâmico de tráfego multimídia em redes híbridas ATM e Ethernet. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p..
12. ANGELIS, A F; RUGGIERO, C A. Comportamento de fluxos IP na rede local do IFSC. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
13. ARANTES, R A T; COSTA, L F. Análise e classificação de formas biológicas. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
14. BIANCHI, A G C; COSTA, L F. Caracterização modelagem e simulação matemático-computacional da dinâmica do crescimento e conexões de células neurais. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p..
15. COSTA, F M G; COSTA, L F. Detecção de padrões através de otimização multidimensional. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p..
16. LI, Z; COSTA, L F. Análise e classificação neuronais naturais baseado em medidas morfométricas. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
17. MARLETTA, A; VEGA, M L; RODRIGUES, C A; MENDONÇA, C R; GOBATO, Y G; COSTA, L F; FARIA, R M. "Aumento da fotoluminescência em filmes de PPV introduzidos por foto-oxidação: um estudo da morfologia de superfície por microscopia de força atômica. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 397-398.
18. NAKAMURA, E K; COSTA, L F. Simulação e análise neuromórfica de estruturas neurais. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p..
19. PAZINATTO, F A C; CRUVINEL, P E; COSTA, L F. Método computacional para otimização do risco decorrente de infestação por plantas daninhas em cultura de soja. In: Workshop dos Alunos de Pós-Graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p..
20. PEREIRA, M F L; CRUVINEL, P E; COSTA, L F. Algoritmo paralelo para reconstrução tridimensional de imagens tomográficas em uma arquitetura reconfigurável com filtragem de Kalman. In: Workshop dos Alunos de pós-graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
21. PRADO, P R R; COSTA, L F. Proposta de medidas geométricas no estudo da variação morfológica em asa de *Drosophila*. In: Workshop dos Alunos de pós-graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.
22. SABINO, D M U; COSTA, L F. Diagnóstico de leucemia auxiliado por computador. In: Workshop dos Alunos de pós-graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p..
23. SOUZA, N C; RODRIGUES, C A; SILVA, J R; COSTA, L F; OLIVEIRA JR, O N; GIACOMETTI, J A. Estudo de filmes automontados de POMA/PVS: tratamento de imagens de AFM. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 404.
24. SOUZA, N C; SILVA, J R; RODRIGUES, C A; COSTA, L F; GIACOMETTI, J A; OLIVEIRA JR, O N. Caracterização morfológica de filmes POMA/PVS. In: Simpósio em Ciência e Engenharia de Materiais - SICEM, 5, São Carlos, 2002. Resumos estendidos. São Carlos, IFSC/EESC/IQSC-USP, 2002. p. 83-84.
25. VEGA, M L; MARLETTA, A; RODRIGUES, C A; MENDONÇA, C R; GOBATO, Y G; COSTA, L F; FARIA, R M. Aumento da fotoluminescência em filmes de PPV induzidos por foto-oxidação: um estudo da morfologia de superfície por microscopia de força atômica. In: Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais, 15, Natal, 2002. Resumos. Natal, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2002. res. 401-012. Em CD-ROM.
26. ANGELIS, A F; RUGGIERO, C A. Comportamento de fluxos IP na rede local do IFSC. In: Workshop dos Alunos de pós-graduação do IFSC, 6, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2002. 1 p.

Artigo de Periódico-Apres/Intr - Internacional

1. COSTA, L F; BELMONTE, J C I. Special Issue: imaging in bioinformatics. Real-Time Imaging, London, vol. 8, n. 3, p. 173-174, Jun. 2002. Fator de impacto: 00.303

Artigo de Periódico-Carta/Editorial - Internacional

1. COSTA, L F; MERIAUDEAU, F. Editorial. EURASIP J. Appl. Signal Process., Cuyahoga Falls, vol. 7, p. 647-648, 2002.

Trabalho de Evento-Resumo - Internacional

1. D'EURYDICE, M N; SIPAHLI, G M. Partículas confinadas em uma caixa: simulações via método de Monte Carlo. In: Simpósio Internacional de Iniciação Científica da Universidade de São Paulo, 10, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Universidade de São Paulo, 2002. res. 818. Em CD-ROM.
2. FABBRI, R; BARRERA, J; COSTA, L F. Um método automático para a segmentação de imagens de biochips. In: Simpósio Internacional de Iniciação Científica da Universidade de São Paulo, 10, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Universidade de São Paulo, 2002. res. 330. Em CD-ROM.
3. OUZA, N C; SILVA, J R; RODRIGUES, C A; HERNANDES, A C; COSTA, L F; GIACOMETTI, J A; OLIVEIRA JR, O N. Diffusion-controlled growth of aggregates in layer-by-layer films of poly(o-methoxyaniline). In: International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals - ICSM 2002, Shanghai, 2002. Book of abstracts. Shanghai, Fudan University, Research Center for Theoretical Physics, 2002. p.14, res. SunA124.
4. TRAVIESO, G.; SIPAHLI, G. M. Simulating semiconductor spectra emissions in a PC cluster. In: SBAC-PAD 2002 - SYMPOSIUM ON COMPUTER ARCHITECTURE AND HIGH PERFORMANCE, 2002, Vitória/ES. 2002.

Recursos Financeiros – Projetos de Pesquisa

1. FAPESP Processo 2000/08266, "Reserva Técnica de Bolsa de Pós-Graduação, Doutorado - DANIELA MAYUMI USHIZIMA SABINO", vigência 01/10/2000 a 30/09/2004, R\$ 11.520,00. Coordenador: LUCIANO DA FONTOURA COSTA
2. FAPESP Processo 1999/01351-2, "Reserva Técnica de Bolsa de Pós-Graduação, Doutorado - MURILLO RODRIGO PETRUCELLI HOMEM", vigência 01/04/1999 a 31/03/2003, R\$ 24.264,00. Coordenador: LUCIANO DA FONTOURA COSTA
3. FAPESP Processo 1998/12425-4, "Reserva Técnica de Bolsa de Pós-Graduação, Doutorado - ANDRÉA GOMES CAMPOS", vigência 01/01/1999 a 31/12/2002, R\$ 24.264,00. Coordenador: LUCIANO DA FONTOURA COSTA
4. FAPESP Processo 2000/07986-9, "Reserva Técnica de Bolsa de Pós-Graduação, Doutorado - CARLOS ALBERTO RODRIGUES", vigência 01/08/2000 a 28/02/2003, R\$ 15.237,00. Coordenador: LUCIANO DA FONTOURA COSTA
5. FAPESP Processo 2000/00523-3, "Reserva Técnica de Bolsa de Pós-Graduação, Mestrado - THATYANA DE FARIA PIOLA", vigência 01/08/2000 a 31/07/2002, R\$ 7.200,00. Coordenador: GONZALO TRAVIESO
6. FAPESP Processo 1999/12765-2, Auxílio Temático "Desenvolvimento e avaliação de métodos originais e precisos em análise de formas e imagens e visão computacional", vigência 01/02/2001 a 31/01/2004, R\$ 472.656,59 e US\$ 308.188,00. Coordenador LUCIANO DA FONTOURA COSTA
7. PRÓ-REITORIA DE PESQUISA, Projeto Especial 1 "Desenvolvimento e Avaliação de Métodos Originais e Precisos em Análise de Formas e Imagens e Visão Computacional", 2º Semestre de 2002, R\$ 3.500,00. Coordenador: LUCIANO DA FONTOURA COSTA
8. Human Frontiers Science Program, Caracterização e modelagem do desenvolvimento do coração em quatro espécies de vertebrados. Início em janeiro de 2003, US\$ 70.000,00 por ano ao longo de três anos. Em colaboração com o Salk Institute- EUA e a Universidade de Viena-Áustria.
9. FAPESP Processo 2001/10674-1, Auxílio Individual à Pesquisa "Desenvolvimento e Aprimoramento de Métodos de Cálculo de Propriedades de Semicondutores Utilizando Computação Paralela

10. PRÓ-REITORIA DE PESQUISA, Projeto Especial 1 "Desenvolvimento e Aprimoramento de Métodos e Cálculo de Propriedades de Semicondutores Utilizando Computação Paralela de Alto Desempenho", Ano base 2002, R\$ 3.500,00. Coordenador: GILHERME MATOS SIPAHI.

Bolsas Produtividade em Pesquisa

1. **Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa**, Bolsa de pesquisador CNPq – Processo no. 301422/92-3: Nível IIB de 01/03/1993 a 28/02/1997, nível IIA de 01/03/1997 a 28/02/2000, **nível IC** de 01/30/2000 a 28/02/2004.
2. **Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi**, Bolsa de pesquisador CNPq – Processo no. 300997/01-0, **nível IIC**, de 01/03/2002 a 28/02/2004.

D. Atividades Acadêmicas e de Extensão Universitária

Atividades Didáticas

Graduação

-  **Prof. Dr. Carlos Antonio Ruggiero**
 1. FFI 323 - Rede de Computadores (1º sem, 60h).
 2. FFI 395 - Arquitetura de Computadores II (2º sem, 90h).
-  **Prof. Dr. Gonzalo Travieso**
 1. FFI 312 - Prog. Orientada ao Objeto (1º sem, 60h).
 2. FFI 313 - Programação Concorrente em Física I (2º sem, 45h).
 3. FFI 314 - Lab. Programação Concorrente em Física (2º sem, 30h).
-  **Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi**
 1. FFI 311 - Arquitetura de Computadores I (1º sem, 60h).
 2. FFI 332 - Programação Voltada à Internet (2º sem, 60h).
-  **Prof. Dr. Jan Frans Willem Slaets**
 1. FFI 198 - Sistemas Operacionais (1º sem, 60h).
 2. FFI 171 - Microprocessadores (2º sem, 60h).
 3. FFI 331 - Tecnologias de Microcomputadores (2º sem, 45h).
-  **Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa**
 1. FFI 320 - Métodos em Física Computacional (1º sem, 90h).
 2. FFI 324 - Processamento de Imagens e Visão (1º e 2º sem, 60h).

Pós-Graduação

-  **Prof. Dr. Carlos Antonio Ruggiero**
 1. FFI 323 - Rede de Computadores (1º sem, 60h)
 2. FFI 395 - Arquitetura de Computadores II (2º sem, 60h)
-  **Prof. Dr. Gonzalo Travieso**
 1. FFI 312 - Programação Orientada ao Objeto (1º sem, 60h)
 2. FFI 313 - Programação Concorrente em Física (1º sem, 45h)
 3. FFI 314 - Laboratório de Programação Concorrente em Física (2º sem, 30h).
-  **Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi**
 1. FFI 311 - Arquitetura de Computadores I (1º sem, 60h).
 2. FFI 332 - Programação Voltada à Internet (2º sem, 60h)
-  **Prof. Dr. Jan Frans Willem Slaets**
 1. FFI 198 - Sistemas Operacionais (1º sem, 60h).
 2. FFI 171 - Microprocessadores I (2º sem, 60h).
 3. FFI 331 - Tecnologia de Microcomputadores (2º sem, 45h).
-  **Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa**
 1. FFI 320 - Métodos em Física Computacional (1º e 2º sem, 60h).
 2. FFI 324 - Processamento de Imagens e Visão (1º sem, 60h).

Orientação Acadêmica e Bolsistas

Pós-Doutoramento

-  **Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa**
 1. Marconi Soares Barbosa, "Dynamic Shape Analysis", vigência 01/07/2002 a 30/06/2003, FAPESP.
 2. Abel Dionizio Azeredo, "Análise, simulação e estimação de equações diferenciais parciais para o desenvolvimento embrionário", vigência 01/12/2002 a 30/11/2003, FAPESP.

Doutoramento

-  **Prof. Dr. Carlos Antonio Ruggiero**
 1. André de Angelis, "Estudo de performance de chaves internet protocol (IP)", Docente na UNICAMP, vigência 02/03/1998 a 11/03/2003, sem bolsa.
-  **Prof. Dr. Gonzalo Travieso**
 1. Claudio De Vincenzi, "Fatores de segurança relativos a ambientes de computação distribuídos em redes públicas", vigência 25/07/1997 a 31/03/2003, sem bolsa.
 2. José Luiz Zem, "Interface de programação para sistemas paralelos tolerantes a falhas", Docente na UNIMEP, vigência 07/08/2000 a 07/08/25005, sem bolsa.
 3. Thatyana de Faria Piola, "Profiling de aplicações paralelas com informações de alto nível de abstração", início sem bolsa em 01/08/2002, vigência 01/03/2003 a 28/02/2007, CNPq.
 4. Eloíza Helena Sonoda, "Um framework de classes para processamento paralelo", vigência 01/02/2002 a 28/02/2006, CAPES.
-  **Prof. Dr. Jan Frans Willem Slaets**
 1. André Muezerie, "Gerenciamento dinâmico de tráfego multimídia em redes híbridas ATM e Ethernet", vigência 01/10/2001 a 01/09/2005, CAPES.
-  **Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa**
 1. Andréa Gomes Campos, "Caracterização, modelagem e simulação matemático-computacional de dinâmica do crescimento e conexões de células neurais", início em agosto 1998 com bolsa FAPESP no período de 01/01/1999 a 20/05/2003.
 2. Murillo Rodrigo Petrucci Homem, "Reconstrução tridimensional de neurônios com o uso de deconvolução a partir de seções ópticas bidimensionais obtidas em microscopia óptica", início em agosto 1998 com bolsa FAPESP no período de 01/04/1999 a 31/05/2003.
 3. Leandro Farias Estrozi, "Análise multi-escala de formas tridimensionais", vigência 10/02/1999 a 28/06/2003, CAPES.
 4. Carlos Alberto Rodrigues, "Aplicações de processamento e análise de imagens para a caracterização e modelagem de imagens de microscopia de varredura de ponta de prova", início em agosto 1999 com bolsa FAPESP no período de 01/08/2000 a 28/02/2003.
 5. Daniela Ushizima, "Diagnóstico de Leucemia Auxiliado por Computador", início em abril 2000 com bolsa FAPESP no período de 01/10/2000 a 30/09/2004.
 6. Edson Koiti Nakamura, "Simulação e análise neuromórfica de estruturas neurais", vigência 01/02/2000 a 28/02/2004, CNPq.

7. Felipe Miney Gonçalves Costa, "Detecção de reta como otimização – consolidando o método de busca por retas", vigência 09/06/1999 até 09/06/2004, sem bolsa.
8. Renata Antonia Tadeu Arantes, "Visão biológica", vigência 01/02/2000 a 28/02/2004, CNPq.
9. Li Zhaoxui, "Análise e Reconhecimento de formas bidimensionais e tridimensionais", CNPq de 28/02/2001 a 28/02/2002, FAPESP de 01/03/2002 a 29/02/2004.
10. Pedro Roberto Rodrigues Prado, "Novas metodologias em morfologia biológica", vigência 19/02/2002 a 19/02/2007, sem bolsa.

Mestrado

Prof. Dr. Gonzalo Travieso

1. Elaine Patrícia Quaresma Xavier. "Interface de Usuário para uso de uma rede de computadores como sistema de processamento paralelo", vigência 01/02/1999 a 01/08/2002, CNPq.
2. Thyana de Faria Piola. "Gerador de cargas sintéticas para o estudo de uso de redes de computadores em processamento paralelo", vigência 01/08/2000 a 27/08/2002, FAPESP.
3. Francisco Aparecido Rodrigues. "Técnicas de Processamento Paralelo para programas Científicos", vigência 01/02/2002 a 28/02/2004, CAPES.
4. Paulino Ribeiro Villas Boas. "Subsistema e Interface de Programação para Balanceamento de Cargas em um Cluster de Computadores", vigência 01/02/2002 a 28/02/2004, CAPES.

Prof. Dr. Jan Frans Willem Slaets

1. Bruno Otto Theodoro Rosa, "Comparação de tecnologias de sistemas de comunicação para processamento paralelo em Clusters", vigência 03/03/1997 a 03/03/2002.
2. Cláudio Massaki Kakuda, "Caracterização do comportamento da rede ATM", 01/03/2002 a 30/03/2006, sem bolsa.

Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa

1. Erbe Pandini, "Simulações e caracterização de formação de padrões neurais por metodologias de física matemática", sem bolsa no período de 01/07/2002 a 30/06/2003, a partir de 01/07/2003 a 30/06/2005, CNPq.

Profa. Dra. Patrícia Magna

1. Michelle Miranda Pereira, "Estudo e Simulação de Mecanismos de Policiamento de Tráfego em Chaves ATM", vigência 01/11/1999 a 01/10/2002, CNPq.

Iniciação Científica

Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi

1. Adriano Batista Prieto. "Processamento Científico em Clusters: montagem, hardware e software", vigência 01/09/2001 a 01/12/2002, sem bolsa.
2. Marcel Nogueira D'Eurydice, "Desenvolvimento de algoritmos científicos baseados no método de Monte Carlo: Estudo dirigido", início em março de 2001 com bolsa CNPq no período de mar/2002 a jul/2002.
3. Marcos Fábio Martins. "Simulação de propriedades óticas em semicondutores: aprendizado de técnicas básicas", vigência ago/2002 a jul/2003, CNPq.

Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa

1. Edson Tadeu Monteiro, vigência 01/03/2002 a 29/02/2004, PIBIC/CNPq.
2. Ricardo de Fabbri, vigência 01/01/2000 a 30/07/2001, PIBIC/CNPq, a partir de 01/11/2001 a 31/10/2002, FAPESP.
3. Leandro Carrijo Cintra, vigência VOTORANTIN desde 2000, vigência 01/05/2001 a 28/11/2002, FAPESP.
4. Bruno Augusto Nassif Travencolo, vigência 01/03/2001 a 28/02/2002, sem bolsa.
5. Leonardo Bellini Coelho, vigência 01/03/2002 a 31/07/2002 e 01/08/2002 a 31/07/2003, PIBIC/CNPq.
6. Gilberto Medeiros Nakamura, vigência 01/03/2002 a 31/07/2002 e 01/08/2002 a 31/07/2003, PIBIC/CNPq.

Teses e Dissertações Concluídas por Docentes e Alunos

Pós-Doutoramento

Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa

1. Marcelo Emilio Beletti "Avaliação do sêmen de touro através de análise de imagem por computador", CNPq. (maio a outubro/2002).

Mestrado

Prof. Dr. Jan Frans Willem Slaets

1. Bruno Otto Theodoro Rosa. "Análise de Sistemas de Comunicação para Computação Paralela em Clusters", IFSC/USP, 28/02/2002. (Orientador)

Prof. Dr. Gonzalo Travieso

1. Thyana de Faria Piola. "Avaliação de Desempenho de Sistemas Paralelos Baseada em Descrição no Programa e da Arquitetura", IFSC/USP, 27/08/2002. (Orientador).

Colaboradora Patricia Magna

1. Michele Miranda Pereira. "Simulação e Análise Comparativa dos Métodos do Mecanismo de Policiamento Dual Leaky Bucket em Chaves VBR para Tráficos de Vídeo", IFSC/USP, 16/10/2002.

Participação em Comissões Julgadoras no IFSC

Dissertação de Mestrado

Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi

1. Bruno Otto Theodoro Rosa, "Análise de Sistemas de Comunicação para computação paralela em Gluster", IFSC/USP, 26/02/2002.
2. Thyana de Faria Piola. "Avaliação de Desempenho de Sistemas Paralelos Baseados em Descrição no Programa e da Arquitetura", IFSC/USP, 27/08/2002. (Orientador).
3. Michele Miranda Pereira. "Simulação e Análise Comparativa dos Métodos do Mecanismo de Policiamento Dual Leaky Bucket em Chaves VBR para Tráficos de Vídeo", IFSC/USP, 16/10/2002.

Prof. Dr. Jan Frans Willem Slaets

1. Bruno Otto Theodoro Rosa, "Análise de Sistemas de Comunicação para computação paralela em Gluster", IFSC/USP, 26/02/2002.

Exame de Qualificação

Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa

1. Ildeberto Aparecido Rodello. "VRML – Um ambiente virtual distribuído para visualização e análise de moléculas de proteínas". IFSC/USP, 12/02/2003. (Doutorado)
2. Patrícia Rufino Oliveira. "Uma abordagem inteligente para auxiliar no processo de segmentação de imagens", IFSC/USP, 06/05/2002. (Doutorado)

Prof. Dr. Gonzalo Travieso

1. Wilson Bittencourt Vicentini, "Desenvolvimento de um Ambiente Integrado e Colaborativo com Suporte à Sincronização de Dados Multimídia Sintéticos para Educação à Distância no Word Wide Web", São Carlos/SP, 18/02/2002. (Doutorado)
2. Rafael Humberto Scapin, "Webcourse: Uma Ferramenta hierárquica para Criação e Gerenciamento de Cursos on line na World – Wide-Web", São Carlos/SP, 10/04/2002. (Doutorado)

Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi

1. Rafael Humberto Scapin, "Webcourse: Uma Ferramenta hierárquica para Criação e Gerenciamento de Cursos on line na World – Wide-Web", São Carlos/SP, 10/04/2002. (Doutorado).
2. Luiz Gonzaga Rios Filho, "Modelagens em Simulação de Neurônios em Meios heterogêneos", São Carlos, 29/05/2002. (Doutorado)

Prof. Dr. Carlos Antonio Ruggiero

1. Wilson Bittencourt Vicentini, "Desenvolvimento de um Ambiente Integrado e Colaborativo com Suporte à Sincronização de Dados Multimídia Sintéticos para Educação à Distância no Word Wide Web", São Carlos/SP, 18/02/2002. (Doutorado)

Prof. Dr. Jan Frans Willem Slaets

1. Wilson Bittencourt Vicentini, "Desenvolvimento de um Ambiente Integrado e Colaborativo com Suporte à Sincronização de Dados Multimídia Sintéticos para Educação à Distância no Word Wide Web", São Carlos/SP, 18/02/2002. (Doutorado)

Tese de Doutorado

Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi

1. Roberto Alves de Oliveira. "Visão Computacional Rápida Utilizando Rede Neural Implementada em Processo Paralelo", São Carlos/SP, 20/09/2002.

Outras participações

Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi

1. Processo seletivo para contratação de especialista em laboratório 2002, IFSC/Universidade de São Paulo.
2. Processo seletivo para contratação de técnico em informática 2002, IFSC/Universidade de São Paulo.

Participação em Comissões Julgadoras Externas ao IFSC

Tese de Doutorado

Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa

1. Marcel Brum, IME-USP, S.Paulo/SP, 26/07/2002.
2. Ricardo José Ferrari. "Detecção computacional de assimetrias entre mamogramas", EESC/DEE/USP, 01/04/2002.
3. Paulo Sérgio Silva Rodrigues. "Um Modelo Bayesiano Combinando Análise Semântica Latente, Agrupamento de Imagens e Atributos Espaciais para Recuperação de Informação Visual", Universidade Federal de Minas Gerais, 12/03/2003.

Exame de Qualificação

Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa

1. Paulo Sérgio Silva Rodrigues. "Recuperação de Informação Visual com Base no Conteúdo Usando Evidências Semânticas", Universidade Federal de Minas Gerais, 24/04/2002. (Doutorado)
2. Marcelo Andrade da Costa Vieira. "Simulação Computacional da Função de Transferência Óptica Completa em Sistemas de Imagens Radiológica e sua Aplicação em um Esquema CAD em Mamografia", EESC/DEE/USP, 18/09/2002. (Doutorado)

Concurso de Livre Docência

Prof. Dr. Jan Frans Willem Slaets

1. Escola Politécnica da USP, São Paulo/SP, 03/06/2002 a 05/06/2002.

Processo Seletivo de Professor Doutor

Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa

1. Edson Toshimi Midorikawa, na especialidade "Arquitetura de Computadores", Escola Politécnica da USP, 02/04/2003 e 03/04/2003.
2. Hae Yong Kim, na especialidade "Processamento, Análise e Síntese de Imagens", Escola Politécnica da USP, 24/02/2003 a 26/02/2003.

Concurso Público para Professor Adjunto

Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa

1. Ricardo Cordeiro de Farias. Programa de Engenharia de Sistemas e Computação, Área de Computação Gráfica, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 18/02/2003 e 19/02/2003.

Assessoria no Julgamento e Avaliação de Projetos

Prof. Dr. Jan Frans Willem Slaets

Assessor da FAPESP - 04 pareceres

Prof. Dr. Gonzalo Travieso

Assessor da FAPESP - 01 parecer

Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa

Assessor da FAPESP – 50 pareceres

Assessor do CNPq – 07 pareceres

Responsabilidade de Docentes do FFI no Setor de Infra-Estrutura do IFSC

Prof. Dr. Jan Frans Willem Slaets

1. Responsável pela Seção do Laboratório de Computação do IFSC/SP (desde 18/11/1994), em 1998 foi denominado Serviço de Informática.
2. Assessor Administrativo da Diretoria do Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, desde 01/09/1998.

Representação e Participação em Comissões no IFSC

Prof. Dr. Gonzalo Travieso

1. Representante Titular da categoria de Professor Doutor junto ao Conselho do FFI, de 25/09/2000 a 24/09/2002.
2. Representante Suplente da categoria de Professor Doutor junto ao Conselho do FFI, de 23/10/2002 a 22/10/2004.
3. Representante Titular da categoria de Professor Doutor junto à Congregação do IFSC, 03/10/2000 a 02/10/2002.

Prof. Dr. Jan Frans Willem Slaets

1. Membro Nato - Professor Titular, junto ao Conselho do FFI.
2. Membro Nato - Professor Titular, junto à Congregação do IFSC.
3. Membro Suplente da Comissão de Graduação do IFSC/USP, de 18/10/1999 a 17/10/2002.
4. Membro Titular na Comissão de Pós-Graduação, de 17/10/2001 a 16/10/2004.
5. Membro Titular - Vice-Diretor do IFSC, junto ao Conselho Técnico Administrativo, de 10/01/2002 a 09/01/2006.

Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa

1. Representante Titular da categoria de Professor Associado junto ao Conselho do FFI, de 25/09/2000 a 24/09/2002.
2. Representante Titular da categoria de Professor Associado junto à Congregação do IFSC, 04/10/2000 a 03/10/2002.
3. Membro Suplente na Comissão de Pós-Graduação, de 17/10/2001 a 16/10/2004

Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi

1. Representante Titular da categoria de Professor Doutor junto ao Conselho do FFI, de 23/10/2002 a 22/10/2004.
2. Representante Suplente da categoria de Professor Doutor junto à Congregação do IFSC, 28/10/2002 a 27/10/2004.

Participação em Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais

Congresso Nacional

Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi

1. Participação do Congresso: EICENS'2002 (International Conference on Superlattices, Nanostructures and Nanodevices), Toulouse, França, de 22/07/2002 a 26/07/2002.
2. Participação do Congresso: BULK NITRIDES 2002, Manaus, de 17/05/2002 a 24/05/2002.

Ressonância Magnética, Espectroscopia e Magnetismo

ÍNDICE

GRUPO DE PESQUISA: RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR	190
A. PRINCIPAIS INDICADORES DE DESEMPENHO E OUTROS DADOS RELEVANTES	190
B. PRÊMIOS E DISTINÇÕES	190
C. ATIVIDADES DE PESQUISA	190
<i>Recursos Humanos</i>	191
<i>Linhas de Pesquisa</i>	193
<i>Publicações</i>	199
<i>Recursos Financeiros – Projetos de Pesquisa</i>	202
<i>Bolsas Produtividade em Pesquisa</i>	204
D. ATIVIDADES ACADÊMICAS E DE EXTENSÃO UNIVERSITÁRIA	204
<i>Atividades Didáticas</i>	204
<i>Orientação Acadêmica e Bolsistas</i>	205
<i>Teses e Dissertações Concluídas por Docentes e Alunos</i>	206
<i>Participação em Comissões Julgadoras no IFSC</i>	207
<i>Participação em Comissões Julgadoras Externas ao IFSC</i>	207
<i>Assessoria no Julgamento e Avaliação de Projetos</i>	208
<i>Responsabilidade de Docentes do FFI no Setor de Infra-Estrutura do IFSC</i>	208
<i>Representação e Participação em Comissões no IFSC</i>	208
<i>Participação em Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais</i>	209
<i>Atividades de Extensão</i>	209
<i>Acordos e Protocolos de Cooperação Científica com Outras Instituições</i>	209

Grupo de Pesquisa: RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

A. Principais Indicadores de Desempenho e Outros Dados Relevantes

Dissertações de Mestrado Defendidas: 02
 Orientações em andamento: 29 (Pós-doutorado = 04; Doutorado = 09; Mestrado = 10 e Iniciação Científica = 06)
 Artigos Publicados em Revistas Internacionais: 13
 Trabalhos Apresentados em Congressos Internacionais: 10
 Artigo Publicado em Enciclopédia Científica Internacional: 01
 Trabalhos Apresentados em Congressos Nacionais: 15
 Pesquisadores Visitantes: 04

B. Prêmios e Distinções

C. Atividades de Pesquisa

- Laboratório de Magneto-Óptica**
Estudo de sólidos isolantes usando espectroscopia óptica e magneto-óptica. Em particular estudo de materiais eletro-ópticos dopados com elementos de transição e complexos metal aminoácidos.
- Laboratório de Imagens**
Pesquisa em Metodologias de Imagens por RMN em continuação à parceria entre o IFSC/USP e a Santa Casa, diante da utilização do Tomógrafo instalado na Santa Casa, em tempo compartilhado pelas duas instituições, o que tem resultado na formação de um Centro Especializado em Pesquisa e Formação de profissionais na área de Aplicações da Ressonância Magnética à Medicina.
Pesquisas em Microimagens de RMN utilizando o Espectrômetro (Varian Inova) e microimagens por ESR pulsado em sólidos.
Pesquisa em Metodologias de Imagens e Espectroscopia de RMN que utilizam Pulsos Adiabáticos.
- Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) e de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE)**
Estudos por técnicas de ressonância magnética em eletrólitos poliméricos e sistemas derivados (blendas e compósitos).
Estudos de Ressonância Magnética em vidros fluoroindatos e fluorogermanatos.
Estudo por Ressonância magnética em Compostos de Intercalação.
- Laboratório de Ressonância Magnética – Varian**
Caracterização da estrutura de curto alcance em sólidos inorgânicos através da espectroscopia por Ressonância Magnética Nuclear de alta resolução.
- Laboratório de Espectroscopia de Alta Resolução por RMN - LEAR**
Estudo da dinâmica e estrutura de polímeros e derivados através de Espectroscopia por Ressonância Magnética Nuclear Uni e Bi-Dimensional e Múltiplo-Quantum em Sólidos.

Recursos Humanos

Docentes

1. **Prof. Dr. Horácio Carlos Panepucci**, Professor Titular, Diretor de IFSC, Department of Physics – University of California at Berkeley/ USA – 1968 a 1969, Department of Physics – University of California at Santa Barbara/ USA – 1976, Department of Physics – University of California at San Francisco/ USA – 1991.
2. **Prof. Dr. José Pedro Donoso Gonzalez**, Professor Associado, Laboratoire de Spectrometrie Physique – Université Scientifique et Medicale de Grenoble/ França – 10/1985 a 07/1987.
3. **Prof. Dr. Tito José Bonagamba**, Professor Associado, Polymer Science and Engineering Department – National Center for Polymer Research – University of Massachusetts at Amherst/ USA – 03/1998 a 07/2000, Department of Chemistry and Ames Laboratory – Iowa State University at Ames/ USA – 03/2000 a 09/2000.
4. **Profa. Dra. Maria Cristina Terile**, Professora Doutora, Laboratoire de Spectrometrie Physique – Université Scientifique et Medicale de Grenoble/ França – 1983 a 1985, Departamento de Física de Materiales – Facultad de Ciencias – Universidad Autonoma de Madrid – 01/1996 a 01/1997.
5. **Prof. Dr. Alberto Tannús**, Professor Doutor, Center for Magnetic Resonance Research – University of Minnesota/ USA – 02/1995 a 08/1997.
6. **Prof. Dr. Claudio José Magon**, Professor Doutor.
7. **Prof. Dr. Renê Ayres Carvalho**, Professor Doutor Aposentado.
8. **Prof. Dr. José Fabian Schneider**, Professor Doutor, Facultad de Matemática, Astronomía y Física (FaMAF), Universidad Nacional de Córdoba (UNC) – 04/1995 a 09/1998, Instituto de Física de São Carlos/ USP – 10/1997 a 12/1999.

Técnicos

1. Eduardo Ribeiro de Azevedo – Físico, Mestre e Doutor em Física Básica (*Lotado no FCM, no entanto desenvolve atividades junto ao FFI*)
2. Édson Luiz Géa Vidoto – Engenheiro, Mestre e Doutor em Física Aplicada
3. Mateus José Martins – Engenheiro, Mestre e Doutor em Física Aplicada
4. Odir Adolfo Canevarollo
5. José Carlos Gazziri
6. João Gomes da Silva Filho

Estagiários

6. Tadeu Lourenço – Diocesano La Salle
7. Marcelo Alves dos Santos – Departamento de Física Geral, Instituto de Física / USP – SP
8. Ariane Fecteau-Lefebvre – École Polytechnique of Montréal in Physical Engineering/ Canadá – 06/06 a 23/08/02
9. Oscar Mateo Lozano – Universidad Politécnica de Valencia / Espanha - 15/07 a 06/09/02
10. Pablo Sánchez Barrio – Universidad de Málaga, UMA/ Espanha - 15/07 a 06/09/2002

Administração

2. Isabel Aparecida Possatto de Oliveira - Secretária

Colaboradores Externos

-  **Prof. Dr. Tito José Bonagamba**
- Prof Dr. Klaus Schmidt-Rohr, Department of Chemistry and Ames Laboratory, Iowa State University, Ames/ USA.
 - Dr. Detlef Reichert, FB Physik, Martin-Luther Universität Halle Wittenberg, FB Physik, Germany.
 - Prof. Jacques Penelle, Polymer Science and Engineering Department – National Center for Polymer Research – University of Massachusetts at Amherst/ USA.
 - Profa. Dr. Anne M. Mayes, Massachusetts Institute of Technology/ USA.
 - Dr. Patrick Judeinstein, Laboratoire de Chimie Structurale Organique, Université Paris-sud, Orsay – France.
 - Prof. Dr. Michel Aegerter, Institut für Neue Materialien, Im Stadtwald, Saarbrücken – Germany
 - Dr. Karim Dahmouche, Departamento de Química da UNESP/ Araraquara.
 - Prof. Jair C. C. de Freitas e Prof. Dr. F. G. Emmerich, Departamento de Física - Centro de Ciências Exatas, Universidade Federal do Espírito Santo.
 - Prof. Dr. Guillermo Gonzales Moraga, Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile.
 - Prof. Dr. Armando L. de Oliveira, ICEx-UFMG.
 - Prof. Dr. Said Rahnamaye Rabbani, Instituto de Física/ USP-SP.
-  **Profa. Dra. Maria Cristina Terile**
- Prof. Dr. Rafael Calvo, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fé/ Argentina.
 - Profa. Dra. Luisa E. Bausá, Departamento de Física de Materiales, da Facultad de Ciencias, Universidad Autonoma de Madrid/ Espanha.
 - Prof. Dr. Juan E. Muñoz Santiuste, Departamento de Física, Escuela Politécnica Superior, da Universidad Carlos III de Madrid/ Espanha.
 - Prof. Dr. José García Solé, Departamento de Física de Materiales, da Facultad de Ciencias, Universidad Autonoma de Madrid/ Espanha.
 - Prof. Dr. Gerson Kniphoff da Cruz, Departamento de Física, da Universidade Estadual de Ponta Grossa.
 - Prof. Dr. Ricardo Costa Santana, Universidade Salgado de Oliveira (Universo/ GO).
 - Prof. Dr. Jesiel F. Carvalho – Instituto de Física, Universidade Federal de Goiás.
-  **Prof. Dr. José Pedro Donoso Gonzalez e Prof. Dr. Claudio José Magon**
- Prof. Dr. Younes Messadeq – Físico química, Unesp/ Araraquara - pesquisa em vidros.
 - Prof. Dr. Sidnei L.J. Ribeiro – Físico químico, Unesp/ Araraquara - pesquisa em vidros.
 - Prof. Dr. Ernesto C. Pereira – Eletroquímica, Universidade Federal de São Carlos - pesquisa em polímeros.
 - Prof. Dr. Guillermo M. Gonzalez – Depto. Química, Univ. de Chile/ Chile - pesquisa em intercalados.
 - Profa. Dra. Agnieszka Paulicka – Depto. Físico Química, IQSC/ USP – pesquisa em eletrólitos poliméricos.
-  **Prof. Dr. Horácio Carlos Panepucci**
- Prof. Dr. Dardo Tomasi, Escuela de Ciencia y Tecnología, Universidad Nacional de San Martín/ Argentina.
 - Profa. Dra. Elisabeth de Castro Caparelli, Escuela de Ciencia y Tecnología, Universidad Nacional de San Martín/ Argentina.
 - Carlos Cabal Mirabal, Universidad de Oriente - Centro de Biofísica Médica (Santiago de Cuba/ Cuba)
-  **Prof. Dr. Alberto Tannús**
- Prof. Dr. M. Garwood, Center of Magnetic Resonance Research, University Minnesota/ Minneapolis – USA.
 - Prof. Dr. Osvaldo Baffa, Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto/ USP.
 - Prof. Dr. Afonso Costa e Silva, Center of Magnetic Resonance Research, University Minnesota/ Minneapolis – USA.
 - Prof. Dr. Dardo Tomasi, Escuela de Ciencia y Tecnología, Universidad Nacional de San Martín/ Argentina.
 - Profa. Dra. Elisabeth de Castro Caparelli, Escuela de Ciencia y Tecnología, Universidad Nacional de San Martín/ Argentina.
 - Prof. Carlos Cabal Mirabal, Universidad de Oriente - Centro de Biofísica Médica (Santiago de Cuba/ Cuba)
-  **Prof. Dr. José Fabian Schneider**
- Prof. Dr. Edgar Dutra Zanotto, Departamento de Engenharia de Materiais, Universidade Federal de São Carlos.
 - Prof. Dr. Younes Messadeq, Instituto de Química, UNESP/Araraquara.
 - Profa. Dr. Maria Alba Cincotto, Departamento de Engenharia de Construção Civil, Escola Politécnica – USP.
 - Profa. Dr. Silvia Cuffini, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas.
 - Prof. Dr. Paulo Monteiro, Department of Civil and Environmental Engineering, University of California, Berkeley.

Pesquisadores Visitantes

- IVAN DOS SANTOS OLIVEIRA JÚNIOR - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas/ Rio de Janeiro - Período: 12/04/2002; 02 a 07/09/2002
- NOAM KAPLAN – Universidade de Israel - Período: 01/05 a 07/05/2002
- JAIR CARLOS CHECON DE FREITAS - Universidade Federal do Espírito Santo – Período: 13 a 17/05/2002; 02 a 04/07/2002

Linhas de Pesquisa

Título 1: "Estudo da dinâmica e estrutura de polímeros e derivados através de Espectroscopia por Ressonância Magnética Nuclear Uni e Bi-Dimensional e Múltiplo-Quantum em Sólidos."

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Tito José Bonagamba
- Dr. Eduardo Ribeiro de Azevedo - Técnico de Nível Superior
- Prof. Dr. Roberto Mendonça Faria
- Dr. Gerson L. Mantovani – Pós-Doc/FAPESP
- Dr. Roberto W. A. Franco – Pós-Doc/FAPESP
- Dra. Cláudia M. G. de Souza – Pós-Doc/RHODIA-UNEMP
- Prof. Jair C.C. de Freitas, Departamento de Física - Centro de Ciências Exatas, Universidade Federal do Espírito Santo.
- Prof. Klaus Schmidt-Rohr – Department of Chemistry, Iowa State University, Ames/ USA.
- Dr. Delfef Reichert – Department of Physics, Martin-Luther University Halle-Wittenberg, Germany
- Dr. Douglas J. Harris, Organic Materials Department, Sandia National Laboratories, Albuquerque, New Mexico/USA
- Dr. Daniel Huster, Institute of Medical Physics and Biophysics, University of Leipzig, Leipzig, Germany
- Dr. Patrick Judeinstein, Laboratoire de Chimie Structurale Organique, Université Paris-sud, Orsay – France.
- André L. B. B. e Silva – Aluno de mestrado - IFSC – USP / CAPES
- José Roberto Tozoni – Aluno de mestrado - IFSC – USP / CNPq

Agências Financiadoras: FAPESP, CNPq, National Science Foundation (NSF) – USA e Deutsche Forschungsgemeinschaft DFG – Germany.

Objetivos: Utilização e desenvolvimento de técnicas de RMN uni e bidimensionais (Exchange, Spin Diffusion, múltiplo-quantum, ...) e Relaxação Magnética em sólidos para o estudo de estrutura e dinâmica de novos materiais.

Resultados: Obtenção de resultados já publicados em artigos (vide publicações)

Título 2: "Computação Quântica Via RMN"

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Tito José Bonagamba
- Dr. Eduardo Ribeiro de Azevedo
- Dr. Edson L. G. Vidoto
- Prof. Dr. Ivan dos Santos de Oliveira Jr. – CBPF
- Prof. Dr. Alberto Passos Guimarães – CBPF
- Dr. Roberto Sarthour – CBPF
- Prof. Jair C.C. de Freitas, Departamento de Física - Centro de Ciências Exatas, Universidade Federal do Espírito Santo.

Agências Financiadoras: FAPESP, CNPq e CAPES

Objetivos: Desenvolvimento de metodologias para a implementação de algoritmos de computação quântica via RMN

Resultados: Obtenção de dados experimentais já aceitos para publicação ("Relaxation of Coherent States in a Two-Qubit NMR Quadrupole System" – Physical Review A) e redação de artigos de divulgação também já aceitos para publicação ("Computação Quântica: manipulando a informação oculta do mundo quântico" Ciência Hoje – capa da Revista e Pesquisa FAPESP)

Título 3: "EPR de Cu^{2+} em L-Arginina"

Pessoal Envolvido:

- Profa. Dra. Maria Cristina Terrile (IFSC/ USP)
- Prof. Dr. René Ayres Carvalho (IFSC/ USP)
- Prof. Dr. Ricardo Costa Santana (Universidade Salgado de Oliveira - Universo/ GO)
- Prof. Dr. Rafael Calvo (Universidad Nacional de Litoral/ Argentina)
- Jesiel F. Carvalho (Instituto de Física, Universidade Federal de Goiás)

Agências Financiadoras: FAPESP, CNPq.

Objetivos: Este projeto tem por objetivo o estudo espectroscópico, óptico e magneto-óptico, de centros eletronicamente ativos, particularmente impurezas de terras raras ou elementos de transição em LiNbO_3 e aminoácidos. Estuda-se, principalmente, impurezas de terras-raras em LiNbO_3 , e recentemente, *Cu em L-arginina*

Resultados: Elaboração e publicação do artigo:

1. Electron spin resonance of Cu^{2+} impurities in L-arginine phosphate monohydrate single crystals.

Título 4: "Estudo por Técnicas de Ressonância Magnética de eletrólitos poliméricos e sistemas derivados (compósitos e blends)."

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. José Pedro Donoso (IFSC/USP)
- Prof. Dr. Claudio José Magon (IFSC/USP)
- Prof. Dr. Ernesto C. Pereira (UFSCar)
- Antonio Carlos Bloes Jr – estudante de doutorado (IFSC/USP)
- Caio E. C. Tambelli – estudante de doutorado (IFSC/USP)
- Cássio C. Tambelli – estudante de doutorado (IFSC/USP)
- Leandro V. S. Lopes – estudante de doutorado (IFSC/USP)

Agências Financiadoras: FAPESP, CAPES, CNPq

Objetivos: Estudar as propriedades de transporte de novos eletrólitos poliméricos com potencial em aplicações em dispositivos tais como as baterias, janelas eletrocromáticas e sensores.

Resultados: Foi desenvolvido um estudo sistemático nos eletrólitos poliméricos compósitos constituídos por um polímero, um sal de lítio e partículas nanométricas de TiO_2 controlando cuidadosamente a metodologia de preparação e as nanopartículas utilizadas (fase, tamanho, porosidade, área superficial).

A técnica de RMN forneceu importantes informações sobre a interação cation-polímero (Li-H) nestes materiais além de contribuir para esclarecer os mecanismos de transporte iônico que levam aos aumentos de condutividade observados.

Um outro estudo foi realizado nos novos condutores iônicos poliméricos formados por um polímero natural (hydroxyethyl cellulose HEC ou um amido) e um sal de lítio. Os estudos de RMN do ^1H e do ^7Li nestes materiais (forma de linha e relaxação nuclear) revelaram que estes filmes de HEC/polímero apresentam o mesmo comportamento qualitativo associado aos eletrólitos poliméricos, como por exemplo, a presença do estreitamento da linha de ressonância provocada pelos movimentos iônicos (Li^+) e das cadeias poliméricas, e a existência de um máximo na dependência térmica da relaxação spin-rede do ^7Li e do ^1H . Os resultados indicaram também uma predominância da fase amorfa, a qual é um comportamento singular já que os eletrólitos poliméricos são geralmente semicristalinos.

Título 5: "Estudos de Ressonância Magnética em vidros fluorinados e fluorogermanatos."

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. José Pedro Donoso (IFSC/USP)
- Prof. Dr. Claudio José Magon (IFSC/USP)
- Prof. Dr. Younes Messadq (Unesp-Araraquara)
- Prof. Dr. Sidnei L. J. Ribeiro (Unesp-Araraquara)
- Prof. Dr. Michel L. Poulain (Univ. Rennes/ França)
- Prof. Dr. José Fabian Schneider (IFSC/USP)
- Caio E. C. Tambelli – estudante de doutorado (IFSC/USP)
- Cássio C. Tambelli – estudante de doutorado (IFSC/USP)

Agências Financiadoras: CAPES, CNPq, FAPESP.

Objetivos: Os objetivos gerais de nossos estudos são esclarecer os mecanismos de transporte iônico, obter parâmetros que descrevam as propriedades estruturais e dinâmicas, obter

informações estruturais de ordem de curto alcance em materiais amorfos onde outras técnicas não são aplicáveis, e identificar os mecanismos de relaxação nucleares que se manifestam nestes sistemas amorfos. A pesquisa de materiais vítreos que apresentam alta condutividade iônica tem recebido considerável atenção nas últimas duas décadas, tanto devido ao seu potencial de uso como eletrólitos sólidos, como também devido à física associada aos processos de transporte nestes materiais. Um dos maiores desafios atuais em física da matéria condensada é a elucidação dos mecanismos de transporte iônico em condutores iônicos rápidos amorfos, o qual exige considerar os caminhos (pathways) de migração iônica, os efeitos de correlação e fenômenos cooperativos, a existência de regiões de conectividade e o processo de percolação associado, a questão do número efetivo de íons que participam no processo de condução iônica.

Resultados: Estudamos os vidros de fluoreto da família dos fluorindetos (materiais que são também condutores iônicos) identificando os mecanismos de relaxação tanto na fase amorfa do material como na fase cristalina, acima da temperatura de transição vítrea. Também foi realizado um estudo sobre o processo de cristalização do vidro utilizando as técnicas de difração de raios-x (DRX), calorimetria diferencial, ressonância magnética nuclear do ^{19}F e ressonância paramagnética eletrônica (RPE) em amostras dopadas com íons paramagnéticos.

Estudamos também uma nova série de vidros do tipo oxifluoretos, que apresentam condutividades iônicas muito elevadas, da mesma ordem das encontradas em condutores superiônicos). Um sistema no qual estamos particularmente interessados são os vidros e as vitro-cerâmicas formadas por óxido de germanato de chumbo (PbGeO_3) e os fluoretos de cádmio e chumbo (CdF_2 e PbF_2).

Título 6: "Estudos por ressonância magnética em compostos de intercalação."

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. José Pedro Donoso (IFSC/USP)
- Prof. Dr. Claudio José Magon (IFSC/USP)
- Prof. Dr. José F. Schneider – (IFSC/USP)
- Prof. Dr. Horacio C. Panepucci – (IFSC/USP)
- Prof. Dr. Guillermo González (Univ. de Chile)
- Antonio Carlos Bloes Jr – estudante de doutorado - (IFSC/USP)

Agências Financiadoras: FAPESP, CNPq, Conicyt (Chile).

Objetivos: Estudar propriedades de transporte em nanocompósito de lítio e aminas em dissulfeto de molibdeno, materiais nos quais observa-se o fenômeno de auto-ordenamento (self assembling) dos átomos de lítio. Os objetivos gerais de nossos estudos são esclarecer os mecanismos de transporte iônico, obter parâmetros que descrevam as propriedades estruturais e dinâmicas, tanto as iônicas como as moleculares; obter informações estruturais, observar os efeitos provocados pela baixa dimensionalidade dos movimentos nas estruturas laminares e identificar os mecanismos de relaxação nucleares que se manifestam nestes sistemas.

Resultados: O estudo dos espectros de ressonância e da relaxação spin-réde do ^7Li e do ^1H no $\text{Li}_{0.1}\text{MoS}_2[\text{HN}(\text{C}_2\text{H}_5)_2]_2$ nos permitiu: (1) determinar os mecanismos de relaxação dominantes; (2) determinar que a alta mobilidade do lítio observada no estudo da relaxação do ^7Li deve-se ao movimento de difusão tipo exchange dos lítios entre sítios de coordenação do mesmo agregado Li_3 ; (3) obter parâmetros dinâmicos que caracterizem os movimentos de grupos moleculares e (4) obter informações estruturais (distâncias inter-nucleares). O resultado mais importante do estudo foi, em nosso entender, a evidência do fenômeno de autordenamento dos átomos de lítio no espaço bidimensional interlaminar do nanocompósito.

Título 7: "Estrutura e dinâmica de spins de centros paramagnéticos através da ressonância paramagnética eletrônica pulsada"

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Cláudio José Magon: IFSC, USP
- Prof. Dr. Otaciro Rangel Nascimento: IFSC, USP
- Prof. Dr. Antônio José da Costa Filho: IFSC, USP
- Prof. Dr. Ladislau Martin Neto: Centro Nacional de Pesquisa e Desenvolvimento de Instrumentação Agropecuária – Embrapa – São Carlos – SP
- Ronny Rocha Ribeiro: estudante de doutorado – Fapesp
- José Fernando Lima: estudante de doutorado – Capes/CNPq

Agências Financiadoras: FAPESP, CAPES.

Objetivos: Este projeto tem como objetivo principal o estudo da dinâmica do spin eletrônico em sistemas magneticamente diluídos através das técnicas experimentais da ressonância paramagnética eletrônica (RPE) de onda contínua e pulsada. As substâncias em estudo se classificam nas áreas de (i) novos materiais vítreos e poliméricos e (ii) moléculas de interesse em processos biológicos. No momento, estuda-se principalmente: (a) centros paramagnéticos existentes em substâncias húmicas, (b) centros paramagnéticos criados por irradiação (raios-X) em monocristais de L-treonina, (c) Marcadores de spins (spin-labels) inseridos em estruturas laminares de LiMoS_2 intercalados com surfactantes. Outro tema de pesquisa a ser desenvolvido neste projeto consiste no desenvolvimento de técnicas modernas associadas a RPE pulsada. Será enfocada a implementação no nosso laboratório de técnicas recentes, já conhecidas pela comunidade científica, assim como, o desenvolvimento de novas técnicas experimentais inéditas. Especial atenção será dada ao desenvolvimento de técnicas associadas à obtenção de imagens de elétrons com alta resolução.

Resultados: Em se tratando de um projeto de pesquisa em Ciência fundamental, pretende-se gerar conhecimentos científicos básicos relevantes na área.

Além disso, é de suma importância dar continuidade à formação científica e acadêmica de estudantes em fase de iniciação científica, mestrado e doutorado. Neste aspecto, a qualidade dos resultados obtidos poderá ser medida através das comunicações em congressos nacionais e internacionais, publicações em revistas especializadas nacionais e internacionais e nas dissertações e teses defendidas.

Título 8: "Estudo de Estrutura de Curto Alcance em Sólidos Inorgânicos Através da Espectroscopia por Ressonância Magnética Nuclear"

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. José Fabian Schneider (IFSC/ USP)
- Prof. Dr. Horacio Carlos Panepucci (IFSC/ USP)
- Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes (IFSC/ USP)
- Prof. Dr. Valmor Roberto Mastelaro (IFSC/ USP)
- Prof. Dr. Edgar Zanoto (UFSCar)
- Profa. Dra. Maria Alba Cincotto (Escola Politécnica/ USP)
- Fábio Aurélio Bonk (estudante de mestrado)
- Rômulo Ferreira de Abreu (estudante de mestrado)

Agências Financiadoras: FAPESP, CAPES.

Objetivos: Este projeto visa estudar por Ressonância Magnética Nuclear problemas que envolvem a caracterização da estrutura local em materiais amorfos e semi cristalinos de interesse tecnológico (cimentos de baixa alcalinidade, vidros para aplicações em dispositivos ópticos e vitrocerâmicas). Com esta finalidade serão implementadas no Laboratório de RMN do IFSC as técnicas de Múltiplo Quanta-Magic Angle Spinning (MQ-MAS) e espectroscopia de nutação.

Estas técnicas permitirão expandir notavelmente a capacidade de análise estrutural de sólidos, através da obtenção de espectros de alta resolução de núcleos quadrupolares de spin semi-inteiro maior de $\frac{1}{2}$. Estas espécies constituem as duas terceiras partes da Tabela Periódica, incluindo núcleos de grande importância tecnológica com ^7Li , ^{11}B , ^{23}Na e ^{27}Al . As técnicas de espectroscopia MQ-MAS e nutação serão aplicadas de maneira combinada com as técnicas standard de alta resolução já disponíveis no IFSC (ressonância dupla e MAS) para núcleos de spin $\frac{1}{2}$.

Resultados: Elaboração e publicação do artigo e dissertação de mestrado:

1. Characterization by Multinuclear High-Resolution NMR of Hydration Products in Activated Blast-Furnace Slag Pastes.
2. "Caraterização da estrutura de curto alcance em materiais pozzolânicos através da espectroscopia por Ressonância Magnética Nuclear de alta resolução"

Autor: Rômulo Ferreira Abreu. Financiamento: CAPES. Defesa: 13/12/2002

Título 9: "Imagem e Espectroscopia localizada por Ressonância Magnética (MRI e MRS)."

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Horacio C. Panepucci
- Prof. Dr. Alberto Tannús
- Edson L. Géa Vidotto
- Mateus José Martins
- Odir Adolfo Canevarollo
- José Carlos Gazziri
- João Gomes da Silva
- Bernd U. Foerster
- Prof. Dr. Dardo Tomasi

- Profa. Dra. Elizabeth C. Caparelli
- Prof. Dr. José F. Schneider
- Rogério F. Xavier (estudante de doutorado)
- Carlos Ernesto Garrido Salmon (estudante de doutorado)
- João Teles de Carvalho Neto (estudante de mestrado)
- Alessandro Aguiar de Castro Sá (estudante de mestrado)
- Lucian Soares Bueno (estudante de mestrado)
- Helka Fabri Broggian Ozelo (estudante de mestrado)
- Fernando Fernandes Paiva (estudante de mestrado)
- Jason A Ismail (estudante de mestrado)

Agências Financiadoras: FAPESP, CNPq, FINEP, PADCT.

Objetivos: Estudos e implementação de métodos para a produção de imagens por Ressonância Magnética e para a obtenção de espectros de NMR provenientes de pequenos volumes localizados dentro de objetos maiores ou, ainda, seres vivos.

As principais aplicações são dirigidas a diagnóstico médico (Tomografia por RM e espectroscopia "in vivo"), aplicações à agricultura incluem estudos de percolação e meios porosos e imagens de frutos e a imagens de pequenos objetos com resoluções da ordem de dezenas de micron.

Resultados: Elaboração e publicação dos artigos:

1. Asymmetrical gradient coil for head Imaging.
2. Optimization of selective inversion pulses by temporal preemphasis.
3. Analytical description of transverse magnetization induced by Adiabatic Excitation with modulated gradients.
4. Aquisição de imagens por inversão-recuperação utilizando pulsos de inversão adiabáticos.

Título 10: "Instrumentação."

Pessoal Envolvido:

- Prof. Dr. Horácio C. Panepucci
- Prof. Dr. Alberto Tannús
- Prof. Dr. Dardo Tomasi
- Profa. Dra. Elizabeth C. Caparelli
- Bernd Uwe Foerster
- Mateus José Martins
- Edson L. Géa Vidotto
- Odir Adolfo Canevarollo
- José Carlos Gazzziro
- João Gomes da Silva
- Helka Fabri Broggian Ozelo (estudante de mestrado)
- Alessandro Aguiar de Castro Sá (estudante de mestrado)

Agências Financiadoras: FAPESP, CNPq, FINEP, PADCT

Objetivos: Desenvolvimento de hardware e software para espectroscopia de Ressonância Magnética Eletrônica e Nuclear, susceptibilidade magnética em MRI, inclusive imagens para aplicações clínicas. Envolvem projeto e construção de hardware de RF de controle e software de controle, reconstrução visualização e manipulação de imagens.

Resultados: Elaboração e publicação dos artigos:

1. Asymmetrical gradient coil for head Imaging.
2. Optimization of selective inversion pulses by temporal preemphasis.
3. Analytical description of transverse magnetization induced by Adiabatic Excitation with modulated gradients.
4. Aquisição de imagens por inversão-recuperação utilizando pulsos de inversão adiabáticos.

Publicações

Artigo Publicado em Periódico – Internacional

1. BLOISE, A C; DONOSO, J P; MAGON, C J; SCHNEIDER, J F; PANEPUCCI, H; BENAVENTE, E; SANCHEZ, V; SANTA ANA, M A; GONZALEZ, G. NMR study of lithium dybutylamine molybdenum disulfide nanocomposite. *Mol. Cryst. Liq. Cryst., Lausanne*, vol. 374, p. 147-152, 2002. Fator de impacto: 00.885
2. BLOISE, A C; DONOSO, J P; MAGON, C J; SCHNEIDER, J F; PANEPUCCI, H; BENAVENTE, E; SANCHEZ, V; SANTA ANA, M A; GONZALEZ, G. NMR study of lithium dynamics and molecular motions in a diethylamine-molybdenum disulfide intercalation compound. *J. Phys. Chem. B, Washington*, vol. 106, n. 44, p. 11698-11707, Nov. 2002. Fator de impacto: 03.386
3. FREITAS, J C C; PASSAMANI, E C; ORLANDO, M T D; EMMERICH, F G; GARCIA, F; SAMPAIO, L C; BONAGAMBA, T J. Effects of ferromagnetic inclusions on 'ANTPOT. 13C' MAS NMR spectra of heat-treated peat samples. *Energy Fuels, Washington*, vol. 18, p. 1068-1075, 2002. Fator de impacto: 01.094
4. GIOTTO, M V; SANGIORGE, C L; HARRIS, D J; OLIVEIRA, A L; SCHMIDT-ROHR, K; BONAGAMBA, T J. Phase behavior and dynamics of the ABA triblock copolymer poly(ethylene glycol) distearate doped with alkali metal salts. *Macromol., Washington*, vol. 35, p. 3576-3583, 2002. Fator de impacto: 03.697
5. HARRIS, D J; BONAGAMBA, T J; SCHMIDT-ROHR, K; SOO, P P; SADOWAY, D R; MAYES, A M. Solid-state NMR investigation of block copolymer electrolyte dynamics. *Macromol., Washington*, vol. 35, p. 3772-3774, 2002. Fator de impacto: 03.697
6. HARRIS, D J; BONAGAMBA, T J; SCHMIDT-ROHR, K. NMR characterization of sodium poly('alpha'-L-glutamate)/poly(ethylene oxide) blends. *Macromol., Washington*, vol. 35, p. 5724-5726, 2002. Fator de impacto: 03.697
7. OLIVEIRA, F D; SCHNEIDER, J F; SIERVO, A; LANDERS, R; PEPLIS, A M G; PIREAUX, J J; RODRIGUES FILHO, U P. Micro- and nanocomposites of Keggin heteropolymetalates in cellulose esters. *Surf. Interface Anal., London*, vol. 34, n. 1, p. 580-582, Aug 2002. Indexado no Science Citation Index. Fator de impacto: 01.215
8. RODELLA, C B; FRANCO, R W A; MAGON, C J; DONOSO, J P; NUNES, L A O; SAEKI, M J; AEGERTER, M; FLORENTINO, A O. 'V IND.2"O IND.5/Ti"O IND.2'catalyst xerogels: method of preparation and characterization. *J. Sol-Gel Sci. Technol., Dordrecht*, vol. 25, p. 75-82, 2002. Fator de impacto: 01.006
9. RODELLA, C B; FRANCO, R W A; MAGON, C J; DONOSO, J P; NUNES, L A O; SAEKI, M J; AEGERTER, M; SARGENTELLI, V; FLORENTINO, A O. 'V IND.2"O IND.5/Ti"O IND.2'catalytic xerogels raman EPR studies. *J. Sol-Gel Sci. Technol., Dordrecht*, vol. 25, p. 83-88, 2002. Fator de impacto: 01.006
10. SANTANA, R C; CARVALHO, J F; AMARAL, S R; VENCATO, I; PELEGRI, F; TERRILE, M C; HERNANDES, A C; CALVO, R. Electron spin resonance of 'Cu pot.2+ impurities in L-arginine phosphate monohydrate single crystals. *J. Phys. Chem. Solids, Oxford*, vol. 63, n. 10, p. 1857-1862, Oct. 2002. Indexado no Science Citation Index. Fator de impacto: 01.003
11. TAMBELLI, C C; BLOISE, A C; ROSARIO, A V; PEREIRA, E C; MAGON, C J; DONOSO, J P. Characterisation of PEO-'AI IND.2"O IND.3' composite polymer electrolytes. *Electrochim. Acta, New York*, vol. 47, p. 1677-1682, 2002. Fator de impacto: 01.597
12. TAMBELLI, C E; DONOSO, J P; MAGON, C J; SCHNEIDER, J F; PEREIRA, E C; ROSARIO, A V. NMR study of the polymer electrolyte formed by ethylene glycol, citric acid and LiCl'O IND.4'. *Mol. Cryst. Liq. Cryst., Lausanne*, vol. 374, p. 141-146, 2002. Fator de impacto: 00.885
13. TOMASI, D; XAVIER, R F; FOERSTER, B; PANEPUCCI, H; TANNUS, A; VIDOTO, E L G. Asymmetrical gradient coil for head Imaging. *Magn. Reson. Med., Washington*, vol. 48, n. 4, p. 707-714, Oct. 2002. Fator de impacto: 03.121.

Trabalho Publicado em Enciclopédia Científica Internacional

1. SCHMIDT-ROHR, K; AZEVEDO, E R; BONAGAMBA, T J. Centerband-Only Detection of Exchange (CODEX): efficient NMR analysis of slow motions in solids. . *Encyclopedia of Nuclear Magnetic Resonance. Advances in NMR. Chichester, John Wiley & Sons*, 2002. v.9. p. 633-642.

Trabalho de Evento-Resumo - Internacional

1. ANDRADE, V F P; TERRILE, M C. Estudos das bases físicas e aplicação a espectroscopia óptica. In: *Simposio Internacional de Iniciação Científica da Universidade de São Paulo*, 10, São Carlos, 2002. Resumos. São Carlos, Universidade de São Paulo, 2002. res. 952. Em CD-ROM.

2. BLOISE, A. C.; DONOSO, J. P.; MAGON, C. J.; ROSARIO, A. V.; PEREIRA, E. C. NMR, DSC and conductivity study of PEO-based composite polymer electrolytes. In: International Symposium on Polymer Electrolytes, 8, Santa Fe, 2002. Abstracts. Santa Fe, 2002. s.p..
3. GONZALEZ, G.; BENAVENTE, E.; SANTA ANA, M. A.; BECKER-GUEDES, F.; MELLO, N. C.; DONOSO, J. P.; PANEPUCCHI, H. C.; BONAGAMBA, T. J. Lithium induced self-assembling of poly(ethylene oxide) intercalated in molybdenum disulfide. In: International Symposium on Polymer Electrolytes, 8, Santa Fe, 2002. Abstracts. Santa Fe, 2002. s.p..
4. LOPES, L. V. S.; DRAGUNSKI, D. C.; PAWLICKA, A.; DONOSO, J. P. Nuclear Magnetic Resonance and conductivity study of starch based polymer electrolytes. In: International Symposium on Polymer Electrolytes, 8, Santa Fe, 2002. Abstracts. Santa Fe, 2002. s.p..
5. FOERSTER, B.; VIDOTO, E.; TANNUS, A.; PANEPUCCHI, H. Optimization of selective inversion pulses by temporal preemphasis. 10^o Scientific Meeting and Exhibition, International Society of Magnetic Resonance in Medicine, Hawaii, 18 a 24/05/2002, vol. 3, p.2496
6. TELES, J. ; PANEPUCCHI, H.; TANNUS, A. Analytical description of transverse magnetization induced by Adiabatic Excitation with modulated gradients. 10^o Scientific Meeting and Exhibition, International Society of Magnetic Resonance in Medicine, Hawaii, 18 a 24/05/2002, vol. 3, p. 2497
7. GIOTTO, M. V., SANGIORGE, C. L., HARRIS, D. J., OLIVEIRA, A. L., SCHMIDT-ROHR, K., BONAGAMBA, T. J. Phase Behavior and Dynamics of the ABA Triblock Copolymer Poly(Ethylene Glycol) Distearate Doped with Lithium Perchlorate In: Annual American Physical Society March Meeting, 2002, Indianapolis - Indiana - USA. Proceedings, 2002.
8. HOU, S., BONAGAMBA, T. J., LIU, S., SCHMIDT-ROHR, K. Multinuclear Solid-State NMR Studies of the Structure of Clay-Polymer Composites and of Fluoropolymers. 44th Experimental Nuclear Magnetic Resonance Conference - ENC, 2002, Savannah - Georgia - USA.. Proceedings, 2002.
9. HOU, S., BONAGAMBA, T. J., BEYER, F. L., SCHMIDT-ROHR, K. Preparation of polymer-clay nanocomposites, and their studies by multinuclear solid-state NMR In: 224th American Chemical Society National Meeting, 2002, Boston. Proceedings, 2002.
10. MASCARENHAS, Y. P., A. C. DORIGUETTO, GUEDES, F. B., BONAGAMBA, T. J., TRIGUEIRO, F. E., AGUIAR, E. F. S. Rietveld Refinement and Solid State NMR of Y Zeolites Ion-Exchanged by Rare Earth In: American Crystallographic Association / American Association for Crystal Growth, 2002, San Antonio - Texas - USA. Proceedings, 2002.

Trabalho de Evento-Resumo - Nacional

- ABREU, R. F.; SCHNEIDER, J. F.; CINCOTTO, M. A. Caracterização da estrutura de curto alcance em cimentos de cinza de casca de arroz através da espectroscopia por Ressonância Magnética Nuclear de alta resolução. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 298-299.
- AZEVEDO, E. R.; BECKER-GUEDES, F.; BONAGAMBA, T. J.; DAHMOUCHE, K.; SCHMIDT-ROHR, K. Movimentos locais em polimetacrilatos de Alquila e heterogeneidades no movimento de cadeias poliméricas em nanocompostos híbridos orgânico-inorgânicos estudados por RMN de "Exchange". In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 421-422.
- AZEVEDO, E. R.; BECKER-GUEDES, F.; BONAGAMBA, T. J.; SCHMIDT-ROHR, K. Estudo da estrutura e da dinâmica de polímeros no estado sólido através da utilização de técnicas avançadas de Ressonância Magnética Nuclear. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 409-410.
- BLOISE, A. C.; DONOSO, J. P.; MAGON, C. J.; ROSARIO, A. V.; PEREIRA, E. C. RMN de ¹H e ¹⁹F de compostos baseados no eletrólito P(O)E IND.8/LiClO IND.4 com nanopartículas de TiO IND.2. In: Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. São Paulo, SBQ, 2002. res. EQ-124.
- BONK, F. A.; SCHNEIDER, J. F.; PANEPUCCHI, H.; CINCOTTO, M. A. Caracterização de produtos hidratados em cimento de escoria em alto forno através da Ressonância Magnética Nuclear. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 298.
- CARREIRA, F. C.; MARTINS, A. B.; DAHMOUCHE, K.; BUENO, L. A.; TAMBELLI, C. E.; DONOSO, J. P.; MAGON, C. J.; MESSADDEQ, Y.; RIBEIRO, S. J. L. Novos condutores superiônicos no sistema PbGeO IND.3'-PbF IND.2'-CdF IND.2'. Caracterização por RMN de ¹H e ¹⁹F e condutividade elétrica. In: Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 25, Pocos de Caldas, 2002. Livro de resumos. São Paulo, SBQ, 2002. res. QM-113.
- FRANCO, R. W. A.; AZEVEDO, E. R.; MARLETTA, A.; FÁRIA, R. M.; BONAGAMBA, T. J. 1D and 2D-magic-angle-spinning exchange NMR study of local dynamics in poly(p-phenylene vinylene) (PPV). In: Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais, 15, Natal, 2002. Resumos. Natal, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2002. res. 401-001. Em CD-ROM.
- LOPES, L. V. S.; TAMBELLI, C. E.; MAGON, C. J.; DONOSO, J. P.; DRAGUNSKI, D.; PAWLICKA, A. Estudo por RMN de eletrólitos poliméricos baseados em amilopectina e LiClO IND.4. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 396.
- MANTOVANI, G. L.; TOZONI, L. R.; FRANCO, R. W. A.; AZEVEDO, E. R.; HAGE, E.; BONAGAMBA, T. J. Visualização da região de fratura em poli(acrilonitrila-butadieno-estireno)-ABS-via imagens por RMN de prótons. In: Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais, 15, Natal, 2002. Resumos. Natal, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2002. res. 405-252. Em CD-ROM.
- PAIVA, F. P.; TANNUS, A.; FOERSTER, B. U.; XAVIER, R. F. Aquisição de imagens por inversão-recuperação utilizando pulsos de inversão adiabáticos. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 63.
- TAMBELLI, C. C.; TAMBELLI, C. E. C.; DONOSO, J. P.; MAGON, C. J.; BUENO, L. A.; MESSADDEQ, Y.; RIBEIRO, S. J. L. Processo de cristalização do vidro PbGeO IND.3'- CdF IND.2' - PbF IND.2'. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 326.
- TAMBELLI, C. E.; DONOSO, J. P.; REGIANI, A. M.; PAWLICKA, A.; GANDINI, J. F. Nuclear magnetic resonance and conductivity study of HEC/polyether based polymer electrolytes. In: Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 25, Caxambu, 2002. Resumos. Caxambu, SBF, 2002. p. 404-405.
- TAMBELLI, C. E.; DONOSO, J. P.; SCHNEIDER, J. F.; MOYA, C. M.; MELNIKOV, P.; RIBEIRO, S. J. L.; MESSADDEQ, Y. Espectroscopia de RMN de alta resolução do ¹H e ¹⁹F no sistema vítreo In(P(O) IND.3') IND.3'-BaF IND.2'. In: Encontro de Físicos do Norte e Nordeste, 20, Recife, 2002. Programa e Resumos. São Paulo, SBF, 2002. p. 153.
- TAMBELLI, C. E.; DONOSO, J. P.; MAGON, C. J.; SCHNEIDER, J. F.; PEREIRA, E. C.; ROSARIO, A. V. Ressonância magnética nuclear do polieletrólito EG/AC dopado com LiClO IND.4. In: Encontro de Físicos do Norte e Nordeste, 20, Recife, 2002. Programa e Resumos. São Paulo, SBF, 2002. p. 152.
- FREITAS, J. C. C.; MOREIRA, J. S.; EMMERICH, F. G.; BONAGAMBA, T. J. Estudo por RMN de ²⁹Si de materiais carbonosos contendo silício preparados a partir da casca de arroz tratada termicamente In: VII Jornada Brasileira de Ressonância Magnética, 2002, Maringá / PR, 2002.

Trabalho de Evento-Resumo Periódico - Internacional

- HOUS S.; BONAGAMBA, T. J.; BEYER, F. L.; SCHMIDT-ROHR, K. Preparation of polymer-clay nanocomposites, and their studies by multinuclear solid-state NMR. Abstr. Pap. Am. Chem. Soc., Washington, vol. 224, p. 190-POLY, Aug 2002. /Apresentado a(ao) ACS Boston National Meeting, 224, Boston, 2002./

Recursos Financeiros – Projetos de Pesquisa

- FAPESP Proc. nº 98/15460-5 – R\$ 36.398,55 (Mat. Consumo Nacional); US\$ 38.900,26 (Mat. Consumo e Mat. Permanente Importado); R\$ 22.338,88 (Reserva Técnica) – Prof. Alberto Tannus - "Desenvolvimento e Implementação de Metodologia de RMN que utilizam Pulsos RF Adiabáticos" – 01/07/1999 a 30/10/2002.
- PADCT/CNPq nº 62.0022/98-1 – R\$ 74.000,00 (material nacional); US\$ 80.000,00 (material importado) – Prof. Horacio C. Panepucci - "Imaging Scanner para Articulações" – 01/04/1998 a 01/04/2003.
- FAPESP Proc. nº 00/02805-6 – R\$ 25.482,03 (Mat. Permanente Nacional; Mat. Consumo Nacional e Serviços de Terceiros no País); US\$ 64.592,92 (Mat. Permanente Importado; Mat. Consumo Importado e Serviços Terceiros no Exterior) e R\$ 34.530,27 (Reserva Técnica) - Prof. Dr. José Fabian Schneider – "Estudo de Estrutura de Curto Alcance em Sólidos Inorgânicos Através da Espectroscopia por Ressonância Magnética Nuclear" – 01/09/2000 a 30/03/2004.
- FAPESP Proc. nº 98/03498-8 – R\$ 5148,00 (1ª Liberação) R\$ 6.372,00 (2ª Liberação) + R\$ 6.372,00 (3ª Liberação) + R\$ 6.372,00 (4ª Liberação) - Prof. José Pedro Donoso González - Reserva Técnica Bolsa de Doutorado de Antonio Carlos Bloise Junior – "Estudo de Eletrólitos Poliméricos por Ressonância Magnética" – 01/09/1998 a 31/08/2002.
- FAPESP Proc. nº 98/07449-1 – R\$ 5149,00 (1ª Liberação) R\$ 6.420,00 (2ª Liberação) + R\$ 6.372,00 (3ª Liberação) + R\$ 6.372,00 (4ª Liberação) - Prof. José Pedro Donoso González - Reserva Técnica de Doutorado de Caio E. de Campos Tambelli – "Estudo por Técnicas de Ressonância Magnética das Propriedades Físicas de Novos Eletrólitos Poliméricos e de Fenômenos de Cristalização em Sistemas Vítreos" - 01/12/1998 a 30/11/2002.
- FAPESP Proc. nº 00/02418-2 – R\$ 14.865,74 (Mat. Permanente e Mat. Consumo Nacional); US\$ 5.480,50 (Mat. Permanente e Mat. Consumo Importado) e R\$ 5.932,42 (Reserva Técnica – Prof. Dr. José Pedro Donoso González – "Estudo das Propriedades Físicas de Eletrólitos Poliméricos de Compostos de Intercalação e de Sistemas Vítreos, por Técnicas de Ressonância Magnética" – 01/01/2001 a 31/12/2002 (aprovado em 2000).
- FAPESP Proc. nº 99/10001-5 – R\$ 26.220,00 (Mat. Permanente Nacional; Mat. Consumo Nacional e Serviços de Terceiros no País); US\$ 35.090,07 (Mat. Permanente e Mat. Consumo Importado) e R\$ 22.263,28 (Reserva Técnica) - Profa. Dra. Maria Cristina Terrile - "Estudo Espectroscópico de Centros Ópticamente Ativos em Sólidos Transparentes" - 01/01/2000 a 30/11/2003.

6. FAPESP Proc. nº 00/00100-0 – R\$ 17.500,00 (mat. permanente e mat. consumo nuclear), US\$ 33.349,00 (mat. permanente e mat. consumo impulsionado) e R\$ 23.034,31 (reserva técnica) – Prof. Dr. Tito José Bonagamba - Estudo da Dinâmica Lenta em Polímeros através de RMN utilizando-se as Técnicas Ecos Rotacionais: CODEX e ODESSA – 01/10/2000 a 30/09/2003.
9. FAPESP Proc. nº 01/09190-0 – R\$ 20.879,00 + US\$ 26.790,00 – Prof. Dr. Tito José Bonagamba - Auxílio Reparo Equipamento (Espectrômetro de Alta Resolução) – 01/10/2001 a 30/10/2002.
10. Pró-reitoria Pesquisa Proc. 2002.1.29359.1.9 – R\$ 3.500,00 – Prof. Alberto Tannús - Recursos Complementares para Apoio a Grupos de Pesquisa.
11. Pró-reitoria Pesquisa Proc. 2002.1.29360.1.7 – R\$ 3.500,00 – Prof. Dr. José Pedro Donoso Gonzalez - Recursos Complementares para Apoio a Grupos de Pesquisa.
12. Pró-reitoria Pesquisa Proc. 2001.1.11106.01.0 – R\$ 3.369,00 – Profa. Dra. Maria Cristina Terile - Recursos Complementares para Apoio a Grupos de Pesquisa (em vigência 2002).
13. Pró-reitoria Pesquisa Proc. 2002.1.23478.01.6 – R\$ 3.500,00 – Prof. Dr. Tito José Bonagamba - Recursos Complementares para Apoio a Grupos de Pesquisa.
14. CCInt - Auxílio Viagem Alemanha - R\$ 1.500,00 - Prof. Dr. Tito José Bonagamba
15. FAPESP Proc. nº 00/10704-5 – R\$ 5148,00 (1ª Liberação) - Prof. Horacio Carlos Panepucci - Reserva Técnica de Doutorado de Carlos Ernesto Garrido Salmon – “Calculo, “Diseno y Construcción” de Bobinas de “RF Y” Gradientes para “RMNI Com Fines” Especificos” – Período: 01/10/2001 a 30/09/2004.
16. FAPESP Proc. nº 02/01882-2 – R\$ 5148,00 (1ª Liberação) - Prof. Claudio José Magon - Reserva Técnica de Doutorado de Ronny Rocha Ribeiro – “Estudo da Estrutura e Dinâmica de Spins de Centros Paramagnéticos em Substâncias Húmicas” – Período: 01/06/2002 a 30/04/2005.
17. FAPESP Proc. nº 00/12555-7 – R\$ 5148,00 (1ª Liberação) + R\$ 6.420,00 (2ª Liberação) – Prof. José Pedro Donoso Gonzalez - Reserva Técnica de Doutorado de Cassio de Campos Tambelli – “Dinâmica do “SPIN” Nuclear e Eletrônico em Novos Materiais através da Ressonância Magnética” – Período: 01/02/2001 a 31/05/2004.

Bolsas Produtividade em Pesquisa

1. **Prof. Dr. Horácio C. Panepucci**, Bolsa Produtividade em Pesquisa Categoria I-A, 01/03/1998 a 28/02/2003, CNPq.
2. **Prof. Dr. José Pedro Donoso**, Bolsa Produtividade em Pesquisa Categoria I-C, 01/08/97 a 31/07/99 e 01/08/99 a 31/07/2003, CNPq.
3. **Prof. Dr. Tito José Bonagamba**, Bolsa Produtividade em Pesquisa Categoria II-A, 01/08/00 a 31/07/04, CNPq.

D. Atividades Acadêmicas e de Extensão Universitária

Atividades Didáticas

Graduação

-  **Prof. Dr. Alberto Tannús**
 1. FCM184 - Laboratório de Física Geral III (1º Semestre, 30 h)
 2. FCM185 - Lab. Física Geral IV (2º Semestre, 90 h)
-  **Prof. Dr. Claudio José Magon**
 1. FFI 106 - Lab. Física III (1º Semestre, 60 h)
-  **Prof. Dr. Horacio Carlos Panepucci**
 1. FCM185 - Lab. Física Geral IV (2º Semestre, 30 h)
-  **Prof. Dr. José Fabian Schneider**
 1. FFI 152 - Lab. Avançado Física I (1º Semestre, 60 h)
 2. FCM153 - Lab. Avançado II (2º Semestre, 60 h)
 3. FFI 181 - Lab. Física Geral II (2º Semestre, 30 h)
-  **Prof. Dr. José Pedro Donoso Gonzalez**
 1. FCM148 - Técnicas Experimentais I (1º Semestre, 45 h)
 2. FCM184 - Laboratório de Física Geral III (1º Semestre, 30 h)
 3. FFI 335 - Física III (1º Semestre, 60 h)
 4. FCM208 - Física (2º Semestre, 60 h)
-  **Prof. Dr. Tito José Bonagamba**
 1. FCM103 - Laboratório Física I (1º Semestre, 60 h)
 2. SLC570 - Prática Ensino Física (Anual, 60 h)
 3. SLC597 - Estrutura da Matéria (Anual, 60 h)

Pós-Graduação

-  **Profa. Dra. Maria Cristina Terile**
 1. SFI5804 - Teoria do Campo Ligante (2º Semestre, 30h)
 2. SFI5800 - Espectroscopia Física (obrigatória) (2º Semestre, 60 h)
-  **Prof. Dr. Tito José Bonagamba**
 1. SFI5777 - Ensino de Física Experimental (1º Semestre, 60h)
 2. QFL5924 - Espectroscopia de Alta Resolução em Sólidos por Ressonância Magnética Nuclear (RMN) (1º Semestre, 40h) (IQ – USP)

Orientação Acadêmica e Bolsistas

Pós-Doutoramento

-  **Prof. Dr. Tito José Bonagamba**
 1. Claudia Maria Guimarães de Souza, “Modificação de Superfície de Poliamida por Grafitização”, RHODIA/UNIEMP, 01/04/2001 a 31/03/2002.
 2. Eduardo Ribeiro de Azevedo - “Desenvolvimento, implementação e utilização de técnicas avançadas de RMN no estudo de materiais orgânicos em estado sólido” – FAPESP, 01/01/2002 a 31/07/2002. (Bolsa cancelada devido à contratação do bolsista como técnico de Nível Superior no IFSC - USP)
 3. Gerson Luiz Mantovani – “Desenvolvimento e estudo de blendas poliméricas. Aplicações e técnicas avançadas de RMN no estado sólido” – FAPESP, 01/08/2002 a 31/07/2003.
 4. Roberto Weider de Assis Franco – “Estudo da dinâmica lenta de polímeros em espaços restritos - nanocompósitos intercalados de argila” - FAPESP, 01/04/2002 a 30/05/2003.

Doutoramento

-  **Prof. Dr. Alberto Tannús**
 1. Rogério Ferreira Xavier – “Desenvolvimento e construção de bobinas de gradiente ativamente blindadas” – CAPES, 01/03/2001 a 28/02/2005.
-  **Prof. Dr. Claudio José Magon**
 1. José Fernando de Lima – “Estudo da Dinâmica de Spins em Polímeros Condutores através da Ressonância Paramagnética Eletrônica Pulsada” – CAPES, 01/06/2001 (em andamento).
 2. Ronny Rocha Ribeiro – “Estudo da estrutura e dinâmica de spins de centros paramagnéticos em substâncias húmicas” - FAPESP, início 01/04/2002
-  **Prof. Dr. Horácio Carlos Panepucci**
 1. Carlos Ernesto Garrido Salmon – “Desenvolvimento e aplicações clínicas de um transdutor integrado para a obtenção de imagens rápidas de crânio em 0.5 Tesla” – FAPESP, 01/10/2001 a 30/11/2004.
-  **Prof. Dr. José Fabian Schneider**
 1. Fábio Aurélio Bonk – “Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear de Multiple Quantum-MAS aplicada ao estudo de estrutura de curto alcance em sólidos” - CNPq, 01/12/2001 (em andamento).
-  **Prof. Dr. José Pedro Donoso Gonzalez**
 1. Antonio Carlos Bloes Junior – “Estudo de Eletrólitos Poliméricos por Ressonância Magnética” – FAPESP, 01/09/98 a 31/08/2002.
 2. Caio Eduardo de Campos Tambelli – “Estudos por técnicas de RM das propriedades físicas de novos eletrólitos poliméricos e fenômenos de cristalização em sistemas vítreos” – FAPESP, 01/12/98 a 30/11/2002.
 3. Cássio de Campos Tambelli – “Dinâmica do ‘Spin’ Nuclear e Eletrônico em Novos Materiais através da Ressonância Magnética” – FAPESP, 01/02/2001 a 30/01/2004.

4. Leandro Vinícius da Silva Lopes - Estudo por RMN de Elementos Fungíveis Baseados em Antropetina e L-PROL - CAPES, início 01/03/2002.

Mestrado

-  **Prof. Dr. Alberto Tannús**
- João Teles de Carvalho Neto – "Descrição Analítica da Magnetização Induzida pela Metodologia GMAX" – Capes, 01/04/2001 a 30/03/2003.
 - Alessandro Aguiar de Castro Sá – "Estudo de Implementação de Algoritmos para síntese de pulsos de excitação seletiva em Ressonância Magnética Nuclear" - S/ bolsa, 01/08/2001 (em andamento)
 - Lucian Soares Bueno – "Aquisição rápida de Imagem com metodologia tipo echo Planar Imaging em 2 Tesla e 9.4. Tesla", CAPES, 01/08/2001 (em andamento).
 - Helka Fabri Brogiani Ozelo – "Homogenização de um Magneto Resistivo com Núcleo de Ferro utilizando-se o Método de Shimming Passivo" - CNPq, início 01/02/2002
 - Fernando Fernandes Paiva – "Metodologias de imagens e espectroscopia de RMN que utilizam pulsos de RF adiabáticos"- CAPES, início 01/02/2002.
-  **Prof. Dr. Claudio José Magon**
- Ronny Rocha Ribeiro – "Espectroscopia de Ressonância Paramagnética Eletrônica de Onda Contínua e Pulsada em Poli(ometoxianilina)", CNPq, 01/03/2000 a 28/02/2002.
-  **Prof. Dr. Horácio Carlos Panepucci**
- Jason A. Ismail – "Implementação da técnica SENSE para redução do tempo de aquisição de imagens por RMN", CNPq, início 01/08/2002.
-  **Prof. Dr. José Fabian Schneider**
- Rômulo Ferreira de Abreu – "Caracterização da estrutura de curto alcance de cimentos de cinza de casca de arroz através da espectroscopia por Ressonância Magnética Nuclear de alta resolução" – CAPES, 01/08/2000 a 13/12/2002.
-  **Prof. Dr. Tito José Bonagamba**
- André Luis B. Batista e Silva – "Preparação e estudo por RMN de compostos intercalados de argilas e polímeros" – CAPES, início 01/01/2002.
 - José Roberto Tozoni – "Estudo do Poli(p-fenileno vinileno) e seus derivados através de Ressonância Magnética Nuclear" - CNPq, início 01/07/2002.

Iniciação Científica

-  **Prof. Dr. Alberto Tannús**
- Daniel Papoti – "Desenvolvimento de bobinas de superfície para metodologias com pulsos de RF Adiabáticos", FAPESP, 01/11/2001 a 30/10/2002.
-  **Profa. Dra. Maria Cristina Terile**
- Idelma Aparecida Alves Terra – "Espectroscopia Física em Sólidos Isolantes" – FAPESP, 01/05/2002 a 30/04/2003.
 - Victoria Flório Pires de Andrade – "Espectroscopia óptica e Ressonância Eletrônica Paramagnética em aminoácidos dopados com íons metálicos" – PIBIC/CNPq, 01/02/2002 a 30/11/2002.
-  **Prof. Dr. Tito José Bonagamba**
- Diogo Profirio de Castro Vieira - Estudo de compostos Híbridos Orgânico – Inorgânicos através de RMN – PIBIC/CNPq (01/08/02 a 01/03/03) – S/ Bolsa nomomento.
 - Carlos Alexandre Brasil – "Estudos de compostos intercalados através de RMN", PIBIC/CNPq, início 01/08/2002.
 - Adalberto Anderlini de Oliveira – "Estudo de Polímeros através de RMN" – S/ bolsa , início 01/03/2002.

Teses e Dissertações Concluídas por Docentes e Alunos

Mestrado

-  **Prof. Dr. Claudio José Magon**
- Ronny Rocha Ribeiro - "Espectroscopia de Ressonância Paramagnética Eletrônica de Onda Contínua e Pulsada em Poli(o-metoxianilina)", CNPq, 18/04/2002.
-  **Prof. Dr. José Fabian Schneider**
- Rômulo Ferreira de Abreu – "Caracterização da estrutura de curto alcance de cimentos de cinza de casca de arroz através da espectroscopia por Ressonância Magnética Nuclear de alta resolução" – CAPES, 13/12/2002.

Participação em Comissões Julgadoras no IFSC

Exame de Qualificação

-  **Prof. Dr. Claudio José Magon**
- Antonio Carlos Bloes Jr - "Spin-Lattice Relaxation Enhancement in Liquid Gallium Confined Within Nanoporous Matrices", 10/07/2002.

Dissertação de Mestrado

-  **Prof. Dr. Claudio José Magon**
- Ronny Rocha Ribeiro - "Espectroscopia de Ressonância Paramagnética Eletrônica de Onda Contínua e Pulsada em Poli(o-metoxianilina)", 18/04/2002.
-  **Prof. Dr. José Fabian Schneider**
- Rômulo Ferreira de Abreu – "Caracterização da estrutura de curto alcance de cimentos de cinza de casca de arroz através da espectroscopia por Ressonância Magnética Nuclear de alta resolução", 13/12/2002.
-  **Prof. Dr. Tito José Bonagamba**
- Flávia Maria Marconi - "Síntese e caracterização de polímeros com propriedades eletroluminescentes", 30/08/2002.

Tese de Doutorado

-  **Prof. Dr. José Fabian Schneider**
- Nara Cristina de Souza – "Adsorção de poli(o-metaxianilina) em filmes automontados", 12/12/2002.
-  **Prof. Dr. Tito José Bonagamba**
- Rodrigo Fernando Bianchi. Título: "Estudo das Propriedades Eletrônicas e Ópticas de Filmes e Dispositivos Poliméricos". Interunidades, 28/01/2002.

Participação em Comissões Julgadoras Externas ao IFSC

Dissertação de Mestrado

-  **Prof. Dr. Alberto Tannús**
- Nilo Antonio Menezes - "Testes de Confiabilidade em espectroscopia por ressonância magnética clínica", FFCL/RPUSP-Ribeirão Preto, 28/06/2002.
-  **Prof. Dr. Claudio José Magon**
- Hoel Cristian Alves – "Eletrólitos sólidos poliméricos à base de hidroxietilcelulose plastificada com glicerol" - Instituto de Química de São Carlos, 27/05/2002.
 - Nilo Antonio Menezes - "Testes de Confiabilidade em espectroscopia por ressonância magnética clínica", FFCL/RPUSP-Ribeirão Preto, 28/06/2002.
-  **Prof. Dr. Horacio Carlos Panepucci**
- Marcelo Alves dos Santos – "Estudo dos Efeitos da Ordem Local sobre a Difusão Iônica Utilizando RMN com Gradiente de Campo Magnético Pulsado" - Instituto de Física USP-SP, 30/10/2002.
-  **Prof. Dr. Tito José Bonagamba**
- Salvador Barreto Belmonte. Título: "Construção de um Espectrômetro de Ressonância Magnética Nuclear de Banda Larga". CBPF-Rio de Janeiro, 20/12/2002

Tese de Doutorado

-  **Prof. Dr. Tito José Bonagamba**
- João Tertuliano Nepomuceno Agra. Título: "Relaxação da Magnetização Nuclear de Água Confinada em Alumina" – Instituto de Física USP-SP, 22/02/2002.

Assessoria no Julgamento e Avaliação de Projetos

-  **Prof. Dr. Horacio Carlos Panepucci**

FAPESP – 01 Pareceres

CNPq – 04 Pareceres

 **Prof. Dr. José Pedro Donoso Gonzalez**

FAPESP – 03 Pareceres

CNPq – 01 Parecer

 **Prof. Dr. Tito José Bonagamba**

FAPESP – 01 Parecer

CNPq – 02 pareceres

Responsabilidade de Docentes do FFI no Setor de Infra-Estrutura do IFSC **Prof. Dr. Alberto Tannús**

1. Oficina de Manutenção de Vácuo – 01/11/2000 até a presente data.

 **Prof. Dr. Claudio José Magon**

1. Oficina de Criogenia – 21/10/1999 até a presente data.

 **Prof. Dr. José Pedro Donoso Gonzalez**

1. Oficina Mecânica – 21/10/1998 até a presente data
2. Gestor Responsável pelo desenvolvimento do "Programa USP de Economia de Energia Elétrica" no IFSC - Presidente da Comissão Energia IFSC - a partir de 19/09/2001.

Representação e Participação em Comissões no IFSC **Prof. Dr. Alberto Tannús**

1. Membro Titular do Conselho Departamental / FFI - 25/09/1998 a 24/09/2002

 **Prof. Dr. Claudio José Magon**

1. Membro Suplente do Conselho Departamental/ FFI - 01/09/1998 a 24/09/2002
2. Membro Titular da Congregação IFSC – 01/11/2001 a 01/10/2002

 **Prof. Dr. Horacio Carlos Panepucci**

1. Membro Nato do Conselho Departamental / FFI
2. Membro Nato da Congregação IFSC
3. Presidente do CTA/ IFSC – 01/08/1998 a 31/07/2002
4. Membro Titular do Conselho do Campus USP/São Carlos – 01/08/1998 a 31/07/2002
5. Membro Titular junto à Comissão de Graduação do IFSC – a partir de 28/10/2002

 **Prof. Dr. José Pedro Donoso Gonzalez**

1. Membro Titular do Conselho Departamental/ FFI – 07/09/2001 a 06/12/2002
2. Membro Titular da CPG – Interunidades/ IFSC – desde 10/11/2000
3. Membro Suplente do CG/IFSC – 14/08/1998 a 26/08/2004
4. Membro Titular do CDCC como encarregado do Setor de Física - desde 10/09/1987

 **Prof. Dr. Tito José Bonagamba**

1. Membro Titular da Congregação IFSC – 28/10/2002 a 27/10/2004
2. Membro Suplente do Conselho Departamental/ FFI – 23/10/2002 a 22/10/2004
3. Membro Suplente da CoPq – 28/10/2002 – 27/10/2004
4. Membro Suplente CTA – 28/10/2002 – 27/10/2004
5. Membro Suplente da Comissão de Graduação do IFSC/USP, 18/03/2002 – 17/03/2005.
6. Membro Suplente da Comissão de Pós-Graduação do IFSC/USP, 23/07/2002 – 10/08/2003.
7. Membro Suplente da Comissão de Graduação do IFSC/USP, 18/03/2002 – 17/03/2005.

Participação em Eventos Científicos, Tecnológicos e Culturais**Congresso Internacional** **Prof. Dr. Horacio Carlos Panepucci**

1. 10th Scientific Meeting and Exhibition, International Society of Magnetic Resonance in Medicine – Honolulu-Hawaii/ USA, 18 a 24/05/2002

 **Prof. Dr. José Pedro Donoso González**

1. 8th International Symposium on Polymer Electrolytes (ISPE-8) – Santa Fé-New Mexico/USA, 19 a 24/05/2002.

Outros **Prof. Dr. Alberto Tannús**

1. Evento FINEP com a participação da USP (atendendo a convite da Pró-reitoria de Pesquisa) – São Paulo-SP - 30/07/2002 a 03/08/2002

Atividades de Extensão **Profa. Dra. Maria Cristina Terile**

1. Espectroscopia Física - curso intensivo de 20 dias ministrado em Comodoro Rivadavia, Argentina (março de 2002).
2. Espectroscopia Física - curso ministrado em UNL Santa Fé, Argentina (em abril e maio de 2002).

Acordos e Protocolos de Cooperação Científica com Outras Instituições **Prof. Dr. Horacio Carlos Panepucci**

1. Convênio Acadêmico com Universidad Nacional de San Martín/ Argentina – Proc.USP nº 2000.1.323766 – Vigência: 2000 a 2002.

 **Prof. Dr. José Pedro Donoso González**

1. Convênio Acadêmico com a Universidad de Chile – Proc.USP nº 2000.1.88.76.7 – Vigência: 17/03/2000 a 16/03/2003.

 **Profa. Dra. Maria Cristina Terile**

1. Convênio Acadêmico com a Universidad Autonoma de Madrid/Espanha – Proc.USP 1999.1.542.76.8 – Vigência: 16/03/2001 a 15/04/2004.
2. Convênio Acadêmico com Universidade Estadual de Ponta Grossa/ PR – Vigência: 13/06/2000 a 12/06/2003.
3. Programa de Cooperación Científica con Ibero-América do Ministerio de Educación y Cultura de España. Coordenado pela Profa. Luisa Bausá da Universidad Autonoma de Madrid.