



Laboratório de Cristalografia da UFMG

Departamento de Física
ICEx -Universidade Federal de Minas Gerais
Av. Antônio Carlos, 6627 CEP: 24210-320
TEL: (55 31) 34095632 FAX: (55 31) 34095600



Laboratório de Cristalografia

Relatório de Atividades 2009-2019

O Laboratório de Cristalografia (LabCri) surgiu em 1976 no Departamento de Física da UFMG (DF-UFMG), funcionando como laboratório multi-usuários com diferentes coordenadores desde sua implementação. Desde 2009 sua equipe-técnica científica trabalha segundo um estatuto de funcionamento que define regras de acesso para diferentes usuários. Em 2018 o LabCri passou a integrar a rede de Centros Nacionais Multiusuários FINEP, na categoria de Centro Consolidado, disponibilizando equipamentos de difração de raios X para pesquisadores oriundos de várias instituições conforme mostrado em seu Relatório de Atividades (<http://www.labcri.ufmg.br/info/relatorio2019.pdf>). O LabCri está fisicamente instalado no DF/ICEx da UFMG, ocupando 105 m² divididos em três ambientes: (i) sala de equipamentos de difração de raios X (60 m²); (ii) sala de técnicos, análise e tratamento de Dados (30 m²); (iii) sala de preparo de amostras (15 m²). Atualmente o LabCri possui equipamentos difração de raios X e pessoal técnico-científico para desenvolvimento de pesquisa em diferentes áreas. Desde 2009 sua equipe-técnica científica trabalha segundo um estatuto de funcionamento o qual tem norteado o uso deste equipamento (ver em <http://www.labcri.ufmg.br/estatuto.php>). Resumidamente, foram definidas as figuras do RESPONSÁVEL e do USUÁRIO de cada projeto; estas denominações são utilizadas em quadros apresentados ao longo desse relatório, sendo que os RESPONSÁVEIS constituem coordenadores de projetos que usam o LabCri, que subscrevem projetos de ampliação e manutenção dos equipamentos.

As análises realizadas no LabCri permitem (i) a determinação de estrutura de compostos orgânicos e inorgânicos, (ii) a determinação da conformação e estereoquímica de compostos orgânicos, (iii) estudo de processos em química de inclusão e catálise, (iv) a análise estrutural de produtos naturais; (v) o estudo de correlação de propriedades Físico-química de sólidos e estrutura cristalina, (vi) a determinação de estrutura de sólidos policristalinos, (vii) a identificação e quantificação de fases; (viii) o estudo de cerâmicas e polímeros, (ix) a caracterização de nanomateriais, entre outros.

Entre 2009 e 2019 LabCri ofereceu suporte para que aproximadamente 153 pesquisadores de diferentes instituições (Tabela 1) realizassem investigação usando técnicas de difração de raios X em sua infraestrutura.

Tabela 1: Origem dos pesquisadores que solicitaram ou realizaram medidas no LabCri entre 2009 e 2019

Instituições	Pesquisadores	Instituições	Pesquisadores
CDTN/CNEN	2	UFMG	86
CEFET-MG	5	UFOP (MG)	8
CODEMIG	1	UFPR (PR)	2
CTNano	1	UFRJ (RJ)	3
IFT Sudeste MG	1	UFRRJ (RJ)	2
NCSU (USA)	1	UFSC (SC)	1
SENAI FIEMG	2	UFSJ (MG)	2
UFAC (AC)	1	UFU (MG)	1
UFES (ES)	1	UFV (M)	1
UFF (RJ)	8	UNESP (SP)	1
UFG (GO)	1	UNIFAL (MG)	8
UFJF (MG)	9	Universidad del Valle (Colômbia)	1



Laboratório de Cristalografia da UFMG

Departamento de Física
ICEx -Universidade Federal de Minas Gerais
Av. Antônio Carlos, 6627 CEP: 24210-320
TEL: (55 31) 34095632 FAX: (55 31) 34095600



UFMA (MA)	1	Universidade de Havana (cuba)	1
-----------	---	-------------------------------	---

As análises realizadas no LabCri entre 2009 e 2019, contribuíram para o desenvolvimento de aproximadamente 399 projetos de pesquisa. A Figura 1, mostra a distribuição de áreas dos projetos desenvolvidos ou em desenvolvimento no LabCri. Como pode ser observado, as áreas de maior destaque são Materiais e Nanotecnologia.

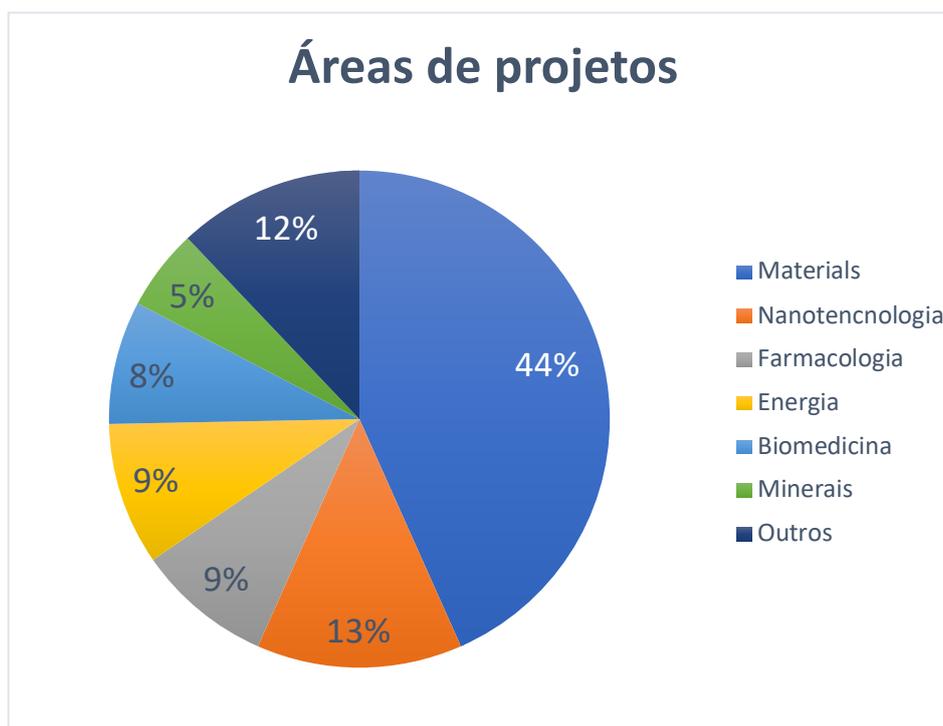


Figura 1: Áreas predominantes dos projetos desenvolvidos no LabCri entre 2009 e 2019.

Com exceção da equipe técnico-científica, os pesquisadores que usam o LabCri, não são institucionalmente ligados a ele. De fato, a maioria dos pesquisadores que usam o LabCri necessitam de técnicas de difração raios X como uma ferramenta de investigação e não é exigido dos usuários a comprovação de resultados objetivos para ter acesso aos equipamentos do LabCri. Assim, a produção científica e tecnológica vinculada ao LabCri não pode ser contabilizada de forma precisa a partir de banco de dados. A tradição do LabCri sempre foi listar na página WEB do LabCri o conjunto da produção de seus usuários declarada na Plataforma Lattes do CNPq. A análise da produção científica dos usuários do LabCri indexada na base Scopus evidencia uma grande correlação com os temas dos projeto (Figura 2). Existe uma predominância de artigos relacionados com desenvolvimento de materiais, seguida por artigos que tratam do tema energia.

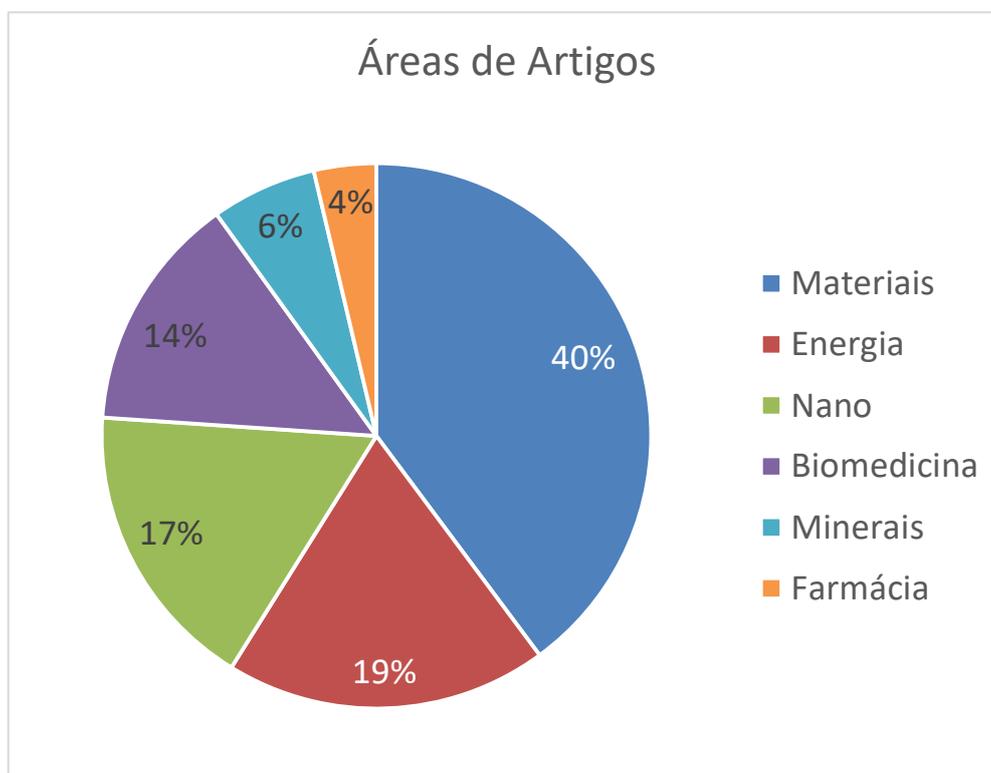


Figura 2: Áreas predominantes dos artigos publicados pelos usuários do LabCri entre 2009 e 2019.

Difração de Policristais

Raios X são utilizados no desenvolvimento das ciências e de áreas tecnológicas. Devido às suas propriedades e características, aplicações propostas há mais de um século continuam sendo utilizadas na atualidade e novas aplicações têm aparecido nas ciências exatas, dos materiais, biológicas, saúde e engenharias. Entre seus empregos destaca-se a difração de raios X. Existem, tanto no Brasil quanto no exterior, um grande número de pesquisadores que utilizam alguma técnica de caracterização e análise por difração de raios X para monitoramento de (1) síntese de compostos, (2) análise estrutural de produtos naturais, (3) análise estrutural de amostras que se transformam ou degradam temporalmente, (4) avaliação das características estruturais de filmes finos e novos materiais, (5) análise de materiais amorfos e policristalinos, (6) análise estrutural de compostos biológicos e macromoléculas, dentre outras.

Entre 1976 e 2012 o LabCri contou apenas com o difratômetro RIGAKU-GEIGERFLEX e seu acessórios de alta e baixa temperatura, para caracterização de materiais na forma policristalina. Em 2012 pesquisadores do DF-UFMG conseguiram recursos junto à CAPES para aquisição de um difratômetro de raios X multipropósitos EMPYREAN- PANalytical para atender a demanda por caracterização de materiais (equipamento instalado em 2013). Em 2018 a equipe técnico-científica do LabCri obteve junto a FINEP recursos que permitiram a aquisição e difratômetro de raios X multipropósitos EMPYREAN- PANalytical com diferentes acessórios para atender a demanda de estudo de nanomateriais e filmes (equipamento instalado em 2019). A operação desses três equipamentos é realizada por dois técnicos especialistas em técnicas de difração de raios X lotados no LabCri. A reserva de equipamentos e solicitação de serviços, são realizados diretamente através da HomePage <http://www.labcri.ufmg.br/> respeitando-se princípio da transparência e impessoalidade.



Laboratório de Cristalografia da UFMG

Departamento de Física
ICEX -Universidade Federal de Minas Gerais
Av. Antônio Carlos, 6627 CEP: 24210-320
TEL: (55 31) 34095632 FAX: (55 31) 34095600



Entre 2009 e 2019 foram desenvolvidos 178 projetos usando os equipamentos RIGAKU-GEIGERFLEX e EMPYREAN- PANalytical. Esses trabalhos foram usados na formação de pelo menos 63 alunos, sendo 27 deles, de doutorado (*Tabela 2*).

Tabela 2: RIGAKU-GEIGERFLEX e EMPYREAN-PANalytical entre 2009 e 2019

Dados	Pesquisadores
Projetos	178
Pesquisadores	70
Instituições	18
Alunos de Doutorado	27
Alunos de Mestrado	27
Alunos de IC	9

Difração de Monocristais

Em 2007 professores de diversas unidades acadêmicas da Universidade Federal de Minas Gerais se organizaram em defesa da implantação de Centro de Caracterização Estrutural de Materiais e Moléculas (CCEM&M). O CCEM&M seria um local onde pesquisadores da UFMG bem como colaboradores externos, encontrariam condições materiais (equipamentos, infraestrutura computacional, ambiente para preparação de amostras, ambientes com condições especiais de atmosfera e temperatura) e humanas (pessoal técnico e pesquisadores especialistas) para desenvolvimento de pesquisa básica e aplicada. Este esforço resultou na aquisição de um difratômetro de raios X (GEMINI) dedicado ao estudo de monocristais e de um espectrômetro de massas. A ideia de se estabelecer o CCEM&M como um centro independente não pode ser concretizada por questões de infraestrutura.

O difratômetro GEMINI foi instalado no Laboratório de Cristalografia – LabCri, no Departamento de Física, em dezembro 2008 e entrou em operação no início de 2009 em regime de multiusuários.

Desde que foi colocado em funcionamento, o difratômetro GEMINI tem desempenhado suas funções de maneira satisfatória. As parcerias iniciais que levaram à aquisição do GEMINI têm se consolidado cada vez mais e novas parcerias têm acontecido continuamente. A Tabela 1 descreve a distribuição do tempo de funcionamento do GEMINI em dias dedicados a cada atividade. O GEMINI está em uso a 3863 dias, sendo que deles, 2043 foram dedicados à realização de medidas ou cursos de formação e capacitação. Assim, o equipamento foi utilizado para realização de medidas em 53% do total de dias transcorridos desde sua instalação. O equipamento ficou parado para manutenção por 425 dias, sendo que desses, 150 foram em 2017. A Figura 3 mostra a taxa de utilização e de paralização para manutenção do equipamento ao longo dos anos

Tabela 3: Uso do GEMINI no período compreendido entre 03/03/2009 a 30/09/2019

Período total de operação do equipamento	3863
Total de dias de uso para medidas	2043
Total de dias em manutenção	425
Total de dias em cursos e eventos	79

Paradas programadas 81

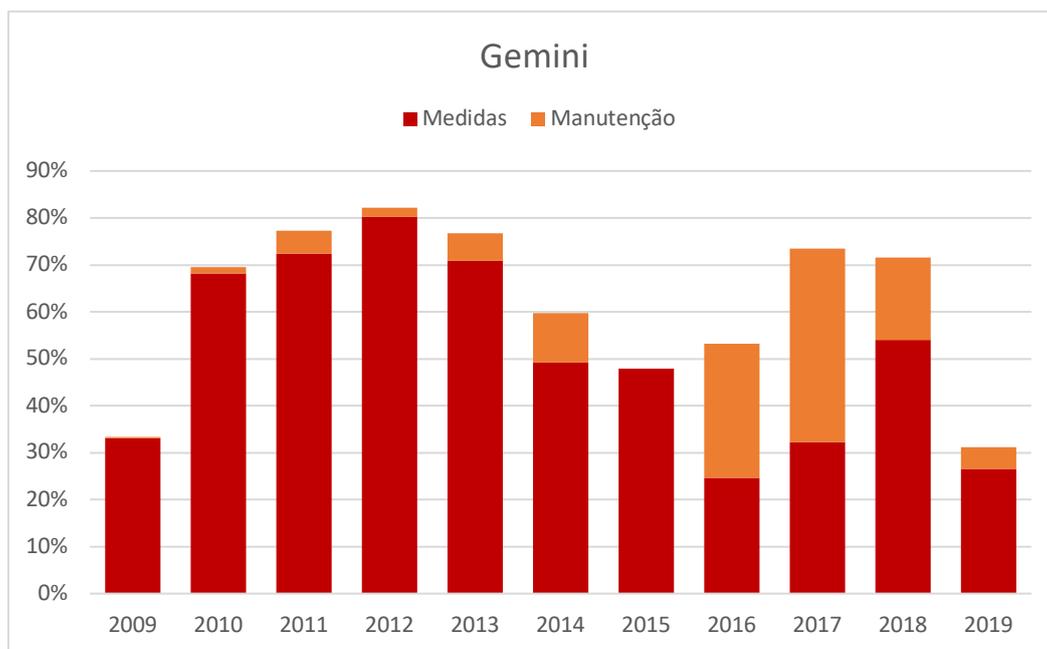


Figura 3: Evolução percentual de dias de uso do GEMINI para realização de medidas em relação ao total de dias do ano.

O diagrama mostrado na Figura 4 apresenta o tempo de utilização do GEMINI por instituição a. A UFMG é instituição que mais utilizou o equipamento, mas ele é também de suma importância regional, como atestado pelo uso de pesquisadores da UNIFAL, UFJF e UFF (Rio de Janeiro).

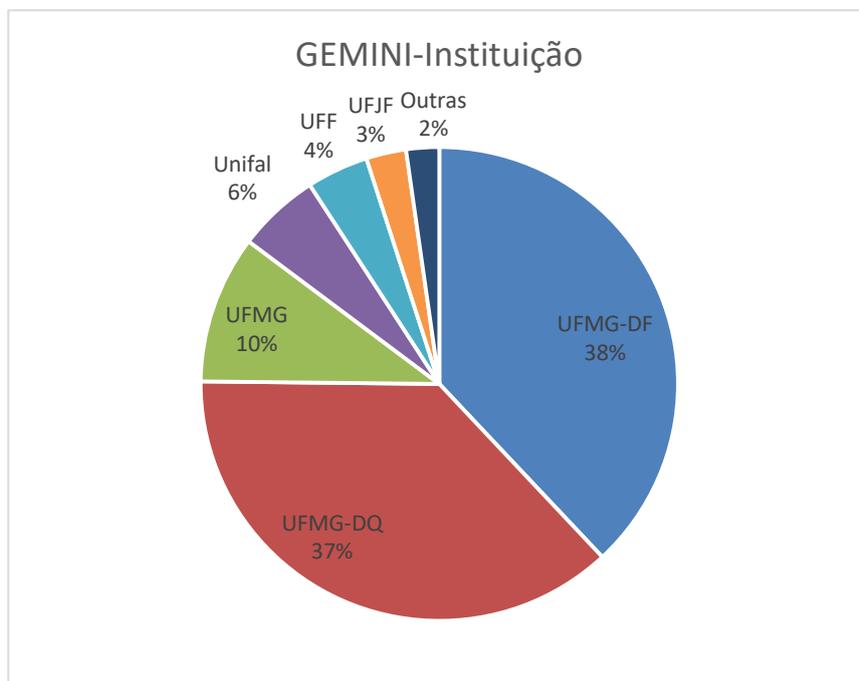


Figura 4: Percentual relativo de uso do GEMINI pelas diferentes instituições.

Entre 2009 e 2019 foram desenvolvidos 221 projetos usando o equipamento GEMINI. Esses trabalhos foram usados na formação de pelo menos XX alunos, sendo YYY deles, de doutorado (*Tabela 2*).

Tabela 4: GEMINI entre 2009 e 2019

Dados	Pesquisadores
Projetos	221
Pesquisadores	45
Instituições	12
Alunos de Doutorado	27
Alunos de Mestrado	27
Alunos de IC	9



Prof. Carlos Basílio Pinheiro

30 de Setembro de 2019