

Departamento de Física dos
Materiais e Mecânica

D F M T

Relatório de Atividades

2001



Instituto de Física
Universidade de São Paulo

APRESENTAÇÃO

Tenho a satisfação de apresentar à comunidade o relatório de atividades do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica referente ao ano 2001.

O DFMT é, entre os departamentos do Instituto de Física, o único inteiramente voltado à pesquisa teórica e experimental em física da matéria condensada. Seus laboratórios representam um patrimônio considerável, construído ao longo de décadas e que não cessa de crescer e se atualizar.

Como pode ser apreciado neste relatório, a produtividade científica do Departamento é muito expressiva: 95 artigos foram publicados, 7 doutorados e 5 mestrados foram concluídos em 2001. Considero auspiciosos estes indicadores, que refletem o trabalho dos 25 docentes e do excelente corpo técnico e administrativo do DFMT.

Prof. Dr. Hercílio Rodolfo Rechenberg
Chefe do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Editor

Prof. Dr. Hercílio Rodolfo Rechenberg
Chefe do DFMT

Editoração

Rosana Batista Gimenes Biz
Secretária do DFMT

Fonte de Dados

Cecília Aparecida Cavalheiro Maia

Secretária do Grupo de Transição de Fase e Supercondutividade e do
Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas - LESBT

Enza Enrica Matteis (de janeiro a agosto de 2001)

Érica Satake Noda (de setembro a dezembro de 2001)

Secretárias do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores - LNMS / MBE

Iran Mamedes de Amorim

Secretário do Laboratório de Materiais Magnéticos - LMM

Marisa Fernandes da Silva

Secretária do Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Impressão

Gráfica do IFUSP (janeiro de 2003)

SUMÁRIO

1 - COMPOSIÇÃO DO DEPARTAMENTO

- 1a. Chefia
- 1b. Conselho Departamental.....
- 1c. Corpo Docente
- 1d. Pessoal Técnico e Administrativo.....

2 - ATIVIDADES DE ENSINO E FORMAÇÃO CIENTÍFICA

- 2a. Disciplinas de Graduação Ministradas no 1º Semestre de 2001.....
- 2b. Disciplinas de Graduação Ministradas no 2º Semestre de 2001.....
- 2c. Disciplinas de Pós-Graduação Ministradas em 2001
- 2d. Seminários
- 2e. Evento
- 2f. Projetos de Pós-Doutorado
- Concluídos
- Em Andamento
- 2g. Doutorados.....
- Concluídos.....
- Em Andamento.....
- 2h. Mestrados
- Concluídos
- Em Andamento.....
- 2i. Projetos de Iniciação Científica

3 - ATIVIDADES DE EXTENSÃO E GESTÃO ACADÊMICA

- 3a. Atividades Administrativas Institucionais.....
- 3b. Assessorias e Consultorias (inclusive arbitragens para revistas).....
- 3c. Cursos, Palestras, Mesas-Redondas e “Invited Talks”
- 3d. Concursos Realizados
- 3e. Participação em Comissões Julgadoras no IFUSP
- 3f. Participação em Comissões Julgadoras em Outras Instituições.....
- 3g. Participação em Conselhos, Comissões e Grupos de Trabalho de
Entidades Oficiais ou Privadas

4 - ATIVIDADES DE PESQUISA

- 4a. Grupos de Pesquisa
- 4b. Trabalhos em Andamento ou Concluídos em 2001.....
- 4c. Projetos de Pesquisa com Financiamento Externo
- 4d. Estágios e Visitas Científicas
- 4e. Participação em Reuniões Científicas Internacionais.....
- 4f. Participação em Reuniões Científicas Nacionais

5 - PRODUÇÃO CIENTÍFICA

- 5a. Trabalhos Apresentados em Eventos Internacionais
- 5b. Trabalhos Apresentados em Eventos Nacionais.....
- 5c. Trabalhos Publicados em Periódicos de Divulgação Internacional e
com Árbitro.....
- 5d. Trabalhos Aceitos para Publicação.....
- 5e. Trabalhos Submetidos à Publicação.....
- 5f. Capítulos de Livros
- 5g. Livro.....

1 - COMPOSIÇÃO DO DEPARTAMENTO

1a - Chefia:

Chefe	Suplente
HERCÍLIO RODOLFO RECHENBERG (23.02.2000 a 22.02.2002)	NEI FERNANDES DE OLIVEIRA JR. (23.02.2000 a 22.02.2002)

1b - Conselho Departamental:

PROFESSORES TITULARES (MS-6)
Adalberto Fazzio Armando Corbani Ferraz (1) Carlos Castilla Becerra Frank Patrick Missell José Roberto Leite Hercílio Rodolfo Rechenberg Nei Fernandes de Oliveira Jr. Sylvio Roberto Accioly Canuto

PROFESSORES ASSOCIADOS (MS-5) (16.09.1999 a 15.09.2001)	
Titulares	Suplentes
Armando Corbani Ferraz (1) Armando Paduan Filho Marília Junqueira Caldas (2) Renato de Figueiredo Jardim	André Bohomoletz Henriques (membro titular a partir de 08.11.2000) Valdir Bindilatti (membro titular a partir de 22.08.2001)

PROFESSORES ASSOCIADOS (MS-5) (21.09.2001 a 20.09.2003)	
Titulares	Suplentes
Armando Paduan Filho Valdir Bindilatti Lucy Vitória Credídio Assali André Bohomoletz Henriques	Renato de Figueiredo Jardim Guennadii Michailovich Gusev (3) Helena Maria Petrilli (4)

PROFESSORES DOUTORES (MS-3) (03.03.1999 a 02.03.2001)	
Titulares	Suplentes
Euzi Conceição Fernandes da Silva Helena Maria Petrilli (4) Carlos Henrique Westphal	Kazunori Watari Antônio José Roque da Silva Valquíria Villas Boas Gomes Missell (6)

PROFESSORES DOUTORES (MS-3) (03.03.2001 a 02.03.2003)	
Titulares	Suplentes
Euzei Conceição Fernandes da Silva Carmen Silvia de Moya Partiti Carlos Henrique Westphal	Luísa Maria Ribeiro Scolfaro Valquíria Villas Boas Gomes Missell (6) Ewout Ter Haar

REPRESENTANTES DISCENTES - PÓS-GRADUAÇÃO (09.02.2000 a 08.02.2001)	
Titular	Suplente
Karina de Oliveira Barbosa	Márcia Tsuyama Escote

REPRESENTANTES DISCENTES - PÓS-GRADUAÇÃO (14.08.2001 a 13.08.2002)	
Titular	Suplente
Márcia Tsuyama Escote	Gustavo Martini Dalpian

REPRESENTANTES DISCENTES - GRADUAÇÃO (07.06.2000 a 06.06.2001)	
Titular	Suplente
Diter Martim Wieser	Eduardo Goldani Altmann

REPRESENTANTES DISCENTES - GRADUAÇÃO (14.08.2001 a 13.08.2002)	
Marcus Cima Ferraz	

1c - Corpo Docente:

PROFESSORES TITULARES (MS-6)

Adalberto Fazzio	RDIDP
Armando Corbani Ferraz (1)	RDIDP
Carlos Castilla Becerra	RDIDP
Frank Patrick Missell	RDIDP
Hercílio Rodolfo Rechenberg	RDIDP
José Roberto Leite	RDIDP
Nei Fernandes de Oliveira Júnior	RDIDP
Sylvio Roberto Accioly Canuto	RDIDP

PROFESSORES ASSOCIADOS (MS-5)

André Bohomoletz Henriques	RDIDP
Armando Paduan Filho	RDIDP
Guennadii Michailovich Gusev (3)	RDIDP
Helena Maria Petrilli (4)	RDIDP
Lucy Vitória Credidio Assali	RDIDP
Renato de Figueiredo Jardim	RDIDP
Valdir Bindilatti	RDIDP

PROFESSORES DOUTORES (MS - 3)

Antônio Domingues dos Santos (7)	RDIDP
Antônio José Roque da Silva	RDIDP
Carlos Henrique Westphal	RDIDP
Carmen Silvia de Moya Partiti	RDIDP
Euzi Conceição Fernandes da Silva	RDIDP
Ewout Ter Haar	RDIDP
Gerardo Fabián Goya (5)	RDIDP
Kazunori Watari	RDIDP
Luísa Maria Ribeiro Scolfaro	RDIDP
Valquíria Villas Boas Gomes Missell (6)	RDIDP

(1) Aprovado no concurso para o cargo de professor titular do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica. Publicação no Diário Oficial de 27.07.2001 (Portaria do Reitor de 16.07.2001).

(2) Aprovada no concurso para o cargo de professora titular do Departamento de Física Experimental. Publicação no Diário Oficial de 06.10.2000 (Portaria do Reitor de 26.09.2000).

(3) Aprovado no concurso para a função de professor associado do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica. Homologação em 29.03.2001. Publicação no Diário Oficial de 14.06.2001.

(4) Aprovada no concurso para a função de professora associada do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica. Publicação no Diário Oficial de 20.02.2001 (Portaria do Reitor de 06.02.2001).

(5) Contratado para a função de professor doutor, a partir de 19.02.2001.

(6) Afastada, com prejuízos dos vencimentos e das demais vantagens do cargo, a partir de 29.10.2001.

(7) Aprovado no concurso para a função de professor associado do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica. Homologação em 20.12.2001.

1d - Pessoal Técnico e Administrativo:

TÉCNICO:

<p>Carlos Alberto Barioni Eronides Alves de Almeida</p>

Fábio Henrique Grossy (admitido em 20.08.2001)
 Flávio do Carmo Fontenelle
 José Alexandre dos Santos
 José Geraldo Chagas
 José Teodósio da Silva
 Luiz Carlos dos Santos
 Marcelo Shiroma Lancarotte
 Márcia Ribeiro (admitida em 26.06.2001)
 Marco Antonio Meira
 Olímpio Ribeiro da Fonseca Neto
 Paulo Sérgio Martins da Silva
 Renato Cohen
 Rui Fernandes de Oliveira
 Sérgio Antonio Romero
 Vagner Aparecido Braghin
 Walter Soares de Lima

ADMINISTRATIVO:

Secretária de Departamento:

Rosana Batista Gimenes Biz

Secretários de Grupos de Pesquisas/Laboratórios:

Cecília Aparecida Cavalheiro Maia	Grupo de Transição de Fase e Supercondutividade Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas
Enza Enrica Matteis Transferiu-se para o ICMC - USP, São Carlos, SP, em setembro de 2001.	Laboratório de Novos Materiais Semicondutores
Érica Satake Noda Admitida em setembro de 2001. Demitiu-se em dezembro de 2001.	
Iran Mamedes de Amorim	Laboratório de Materiais Magnéticos
Marisa Fernandes da Silva	Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Contínuo:

Marcos de Oliveira Neves

2 - ATIVIDADES DE ENSINO E FORMAÇÃO CIENTÍFICA

2a - Disciplinas de Graduação Ministradas no Primeiro Semestre de 2001:

AM - número de alunos matriculados

AA - número de alunos aprovados

RN - número de alunos reprovados por nota

RFN - número de alunos reprovados por frequência e nota

Docentes	Disciplinas	Sigla	Nº Créditos	AM	AA	RN	RFN
André Bohomoletez Henriques	LICENÇA-PRÊMIO						
Antônio Domingues dos Santos	Física IV	FAP 212	06	55	38	03	14
Antônio José Roque da Silva	Física II	FEP 112	06	59	45	05	09
Armando Corbani Ferraz	Eletricidade I	FGE 270	04	63	29	15	19
Armando Paduan Filho	Laboratório de Física Moderna	FNC 377	04	21	20	00	01
Carlos Castilla Becerra	Física para Engenharia III	FGE 2295	04	79	54	13	12
Carlos Henrique Westphal	Física para Engenharia Elétrica III	FAP 2292	06	58	52	04	02
Carlos Henrique Westphal	Física para Engenharia Elétrica III	FAP 2292	06	58	55	03	00
Carlos Henrique Westphal	Física para Engenharia Elétrica III	FAP 2292	06	57	49	07	01
Carlos Henrique Westphal	Física para Engenharia Elétrica III	FAP 2292	06	54	50	04	00
Carmen Silvia de Moya Partiti	Introdução às Medidas em Física	FAP 152	06	51	44	02	05
Euzi Conceição F. da Silva	Introdução à Física	FAP 100	06	53	40	06	07
Ewout Ter Haar	Introdução às Medidas em Física	FAP 181	04	79	76	02	01
Frank Patrick Missell	Física para Engenharia III	FGE 2295	04	64	40	23	01
Gerardo Fabián Goya	Física para Ciências Biológicas I	FGE 1187	06	50	48	01	01
Guennadii Michailovich Gusev	Laboratório de Física III - Escola Politécnica	FGE 2297	02	22	21	00	00
Guennadii Michailovich Gusev	Laboratório de Física III - Escola Politécnica	FGE 2297	02	19	15	00	04
Guennadii Michailovich Gusev	Laboratório de Física III - Escola Politécnica	FGE 2297	02	18	15	00	03
Helena Maria Petrilli	Física para Engenharia IV	FAP 2296	04	190	76	55	59
Hercílio Rodolfo Rechenberg	Laboratório de Física para Ciências Biológicas	FGE 1189	02	15	14	00	01
Hercílio Rodolfo Rechenberg	Laboratório de Física para Ciências Biológicas	FGE 1189	02	14	14	00	00
Hercílio Rodolfo Rechenberg	Laboratório de Física para Ciências Biológicas	FGE 1189	02	16	16	00	00
José Roberto Leite	Mecânica Quântica I	FMA 403	04	70	51	08	11
Kazunori Watari	Mecânica II	FMT 306	04	30	22	03	05
Lucy Vitoria Credidio Assali	Introdução à Física	FAP 100	06	56	35	07	14
Luísa Maria Ribeiro Scolfaro	Física III - Instituto de Química	FGE 0245	06	43	32	10	01
Nei Fernandes Oliveira Jr	Técnica Básicas	FMT 203	03	22	20	00	02
Nei Fernandes Oliveira Jr	Técnica Básicas	FMT 203	03	18	16	00	02
Renato de Figueiredo Jardim	Introdução às Medidas em Física	FAP 181	06	75	69	55	01
Sylvio Roberto Accioly Canuto	Física Moderna II	FNC 376	04	64	54	06	04
Valdir Bindilatti	Termodinâmica	FMT 308	04	66	34	19	13
Valquíria Villas-Boas G. Missell	Eletromagnetismo para Geociências	FAP 0291	06	48	36	02	10

2b - Disciplinas de Graduação Ministradas no Segundo Semestre de 2001:

AM - número de alunos matriculados

AA - número de alunos aprovados

RN - número de alunos reprovados por nota

RFN - número de alunos reprovados por frequência e nota

Docentes	Disciplinas	Sigla	Nº Créditos	AM	AA	RN	RFN
Adalberto Fazzio	Introdução à Física Atômica e Molecular	FNC 315	04	23	16	02	05
André Bohomoletez Henriques	Física para Engenharia II	FEP 2196	04	72	53	11	08
Antônio Domingues dos Santos	Física dos Materiais	FMT 502	04	50	46	01	03
Antônio José Roque da Silva	Introdução à Física do Estado Sólido	FMT 402	04	20	18	00	02
Armando Corbani Ferraz	Eletricidade I	FGE 270	04	62	39	08	15
Armando Paduan Filho	Laboratório de Física III	FGE 248	02	03	03	00	00
Armando Paduan Filho	Laboratório de Física IV - Escola Politécnica	FAP 2298	02	18	18	00	00
Carlos Castilla Becerra	Física IV - Escola Politécnica	FAP 2296	04	68	57	06	05
Carlos Henrique Westphal	SEM CARGA DIDÁTICA						
Carmen Silvia de Moya Partiti	SEM CARGA DIDÁTICA LICENÇA-MÉDICA e LICENÇA-PRÊMIO						
Euzi Conceição F. da Silva	Introdução à Física do Estado Sólido	FMT 402	04	38	29	04	05
Ewout Ter Haar	Laboratório de Física II	FEP 2198	02	17	14	01	02
Ewout Ter Haar	Laboratório de Física II	FEP 2198	02	14	14	00	00
Ewout Ter Haar	Laboratório de Física II	FEP 2198	02	15	14	00	01
Frank Patrick Missell	COBRANDO CARGA DUPLA						
Gerardo Fabián Goya	Mecânica para Geociências	FAP 192	06	75	49	11	15
Guennadii Michailovich Gusev	Laboratório de Física IV - Escola Politécnica	FAP 2298	02	18	16	00	02
Guennadii Michailovich Gusev	Laboratório de Física IV - Escola Politécnica	FAP 2298	02	12	11	00	01
Guennadii Michailovich Gusev	Laboratório de Física IV - Escola Politécnica	FAP 2298	02	08	06	00	02
Helena Maria Petrilli	Física IV - Escola Politécnica	FAP 2296	04	73	54	15	04
José Roberto Leite	Mecânica Quântica II	FMA 404	04	45	38	03	04
Kazunori Watari	Mecânica I	FMT 305	06	58	34	05	19
Lucy Vitoria Credidio Assali	BÔNUS NOTURNO						
Nei Fernandes Oliveira Jr	Termodinâmica I	FMT 159	04	64	48	05	11
Renato de Figueiredo Jardim	Física para Ciências Farmacêuticas	FAP 184	04	69	64	04	01
Valdir Bindilatti	Introdução à Mecânica Clássica	FMT 401	04	18	05	04	09

2c - Disciplinas de Pós-Graduação Ministradas em 2001:

Docentes	Disciplinas	Sigla	Semestre
Adalberto Fazzio	Física do Estado Sólido	FMT5835	1°
Frank Patrick Missell	Ferromagnetismo	FMT 775	1°
Hercílio Rodolfo Rechenberg	Física do Estado Sólido I	FMT 814	2°
Lúisa Maria Ribeiro Scolfaro	Física de Semicondutores	FMT 818	2°
Sylvio Roberto Accioly Canuto	Métodos Clássicos e Quânticos de Estrutura Eletrônica	FMT 832	2°

2d - Seminários:

- Realização do “Journal Club”
Coordenação: Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais
- Realização do “CoffeeShop: Seminários de Física Computacional”
Coordenação: Profa. Dra. Helena Maria Petrilli
Profa. Dra. Marília Junqueira Caldas - Departamento de Física Experimental

“A Interação N-Bi na Liga Isovalente GaAsN_{Bi}”

Seminário do Grupo Teórico de Materiais

Dr. Anderson Janotti, National Renewable Energy Laboratory, Golden, CO, EUA

Data: 02.02.2001

“Adsorção de Xe sobre Superfícies Metálicas: Um Estudo de Primeiros Princípios”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Dr. Juarez L.F. da Silva, Fritz-Haber der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin, Alemanha

Data: 14.03.2001

“Electronic Properties of Quasi-Periodic Heterostructures”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Dr. Victor R. Velasco, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, (CSIC), Madrid, Espanha

Data: 21.03.2001

“Spheres - Omni-Directional Gravitational-Wave Antennas for Next Generation”

Seminário Especial do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Ho Jung Paik, Universidade de Maryland, EUA

Data: 22.03.2001

“Nanotubos de Carbono dopados com Silício”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Dr. Adalberto Fazzio, IFUSP

Data: 03.04.2001

“Estudo Sistemático da Liga SiGe e seus Defeitos Intrínsecos”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Dr. Pedro Venezuela, Pós-Doutorando, IFUSP

Data: 06.04.2001

“Cálculos Relativísticos para os Compostos em Camadas EuM_2P_2 (M = metal de transição)”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Profa. Dra. Diana Josefina Rosa Guenzburger, Centro Brasileiro de Pesquisas Física - C.B.P.F., Rio de Janeiro

Data: 17.04.2001

“Nitretos do Grupo - III: Propriedades Estruturais, Eletrônicas e Termodinâmicas”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Lara Kühl Teles, Estudante de Doutorado, IFUSP

Data: 09.05.2001

“Molecular Hydrogen in a-Si:H”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Gustavo Martini Dalpian, Estudante de Doutorado, IFUSP

Data: 25.05.2001

“Self-Consistent Theory of Raman Scattering for Non-Uniform Electron Gases”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Dr. Virgílio de Carvalho dos Anjos, Hamburg University, Alemanha

Data: 30.05.2001

“Efeitos Cooperativos em Ligações de Hidrogênio”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Roberto Rivelino, Estudante de Mestrado, IFUSP

Data: 01.06.2001

“Propriedades Eletrônicas de Poços Quânticos e Super-Redes de Nitretos e Arsenetos dopados Tipo-p”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Sara Cristina P. Rodrigues, Estudante de Doutorado, IFUSP

Data: 20.06.2001

“Ab Initio Statistical Mechanics for Alloy Phase Diagrams and Ordering Phenomena including the Effect of Vacancies”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Pablo Guillermo Gonzales Ormeño, Estudante de Doutorado, IFUSP

Data: 22.06.2001

“Estrutura Eletrônica, Propriedades Magnéticas e Propriedades de Transporte de Nanoestruturas de GaMnAs”

Seminário do Grupo de Novos Materiais Semicondutores

Prof. Dr. Ivan C. da Cunha Lima, Instituto de Física da Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro

Data: 29.06.2001

“Computational Design of Direct-Bandgap Semiconductors that Lattice-Match Silicon”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Marcilei A. Guazzelli da Silveira, Estudante de Doutorado, IFUSP

Data: 29.06.2001

“Efeitos de Pressão em Nanotubos de Carbono”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Frederico Ayres de Oliveira Neto, Estudante de Doutorado, IFUSP

Data: 17.08.2001

“Chemistry Beyond the Molecule”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Liliana Y. A. Dávila, Estudante de Doutorado, IFUSP

Data: 31.08.2001

“Ge Self-Diffusion in Epitaxial Si_{1-x}Ge_x Layers”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Fábio Campos Poderoso, Estudante de Mestrado, IFUSP

Data: 14.09.2001

“Local-Density Approximation for a Luttinger Liquid”

Seminário do Grupo Teórico de Materiais

Dr. Klaus Capelle, Instituto de Química de São Carlos - USP, São Carlos, SP

Data: 04.10.2001

“Propriedades Mecânicas e Mecanismos de Formação de um Fio de Átomos de Ouro”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Frederico Dutilh Novaes, Estudante de Doutorado, IFUSP

Data: 05.10.2001

“Band Gap renormalization in resonant Raman spectra of multilayers systems”

Seminário do Grupo de Novos Materiais Semicondutores

Dr. Virgílio de Carvalho dos Anjos

IFUSP, São Paulo, SP

Data: 24.10.2001

“The Science and Detection of Gravitational Waves”

Colóquio proferido no IFUSP (a convite do Prof. Dr. Nei Fernandes de Oliveira Jr.)

Prof. Dr. Barry C. Barish, Director of the LIGO Project, California Institute of Technology, EUA

Data: 25.10.2001

“Magnetic Semiconductors”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Prof. Dr. Olle Eriksson, Physics Department, Uppsala University, Uppsala, Suécia

Data: 26.10.2001

“Material's Properties from Density Functional Theory”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Dr. Olle Eriksson, Physics Department, Uppsala University, Uppsala, Suécia

Data: 30.10.2001

“Propriedades Elétricas e Vibracionais dos Nitretos do Grupo-III”

Seminário do Grupo de Novos Materiais Semicondutores

Jose Rafael León Fernandez, Estudante de Doutorado, IFUSP

Data: 04.11.2001

“Comportamento da magnetização reversível em relação ao mecanismo de inversão: um estudo de filmes nanocristalinos de SmCo e SmCo/Fe”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Dr. Daniel R. Cornejo, Faculdade de Matemática, Astronomia e Física, Universidade Nacional de Córdoba, Argentina

Data: 06.11.2001

“Computação Quântica”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Prof. Dr. Paulo Teotônio Sobrinho, IFUSP

Data: 09.11.2001

“Response Theory Calculations of Nonlinear Optical Properties”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Dr. Hans Agren, Royal Institute of Technology, Estocolmo, Suécia

Data: 13.11.2001

“Separação de Fase em Nitretos Cúbicos do Grupo-III”

Seminário do Grupo de Novos Materiais Semicondutores

Profa. Dra. Luísa Maria Ribeiro Scolfaro, IFUSP

Data: 13.11.2001

“É tudo uma questão de contato”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Dr. Ronei Miotto, IFUSP

Data: 30.11.2001

2e - Evento:

MINI-WORKSHOP EM FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA

International Iberoamerican School on Epitaxial Growth of Semiconductor Nanostructures

Organizadores:

Prof. José Roberto Leite

Prof. Joaquín Tutor-Sánchez (Red IX.E- CYTED)

Prof. Eduardo Abramof (LAS-INPE)

Comitê Organizador Local:

Prof. José Roberto Leite (IFUSP)

Prof. Joaquín Tutor-Sánchez (Red IX.E- CYTED)

Prof. Eduardo Abramof (INPE)

Profa. Luisa M. R. Scolfaro (IFUSP)

Prof. Alain A. Quivy (IFUSP)

Dr. Antonio Yukio Ueta (INPE)

Dra. Sara C. P. Rodrigues (IFSC-IFUSP)

MSc. David Pacheco Salazar (IFUSP)

Período: de 19 a 23 de novembro de 2001.

Palestrantes Convidados

- Prof. Alain A. Quivy - Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP
MBE growth of III-V compounds at the LNMS/IFUSP
- Prof. Eduardo Abramof - Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE, São José dos Campos, SP
Molecular beam epitaxy of IV-VI compounds
- Prof. Gilberto Medeiros Ribeiro - Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS, Campinas, SP
Thermodynamics of nanocrystal growth

- Prof. Helmut Sitter - Johannes Kepler Universität, Institut für Experimental Physik, Alemanha
Fundamentals of molecular beam epitaxy
- Prof. Isaac H. Calderón - Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN - CINVESTAV, Departamento de Física, México D.F., México
Growth and characterization of ordered alloys and ultra-thin quantum wells of II-VI semiconductors
- Prof. Jaime A. Freitas - ESTD - Electronic Materials Branch, do Naval Research Laboratory, em Washington D.C., EUA
Growth and characterization of undoped and doped GaN films grown by metal-organic chemical vapor deposition
- Prof. Klaus Lischka - Universidade Paderborn, Departamento de Física, Paderborn, Alemanha
The epitaxy of cubic group III-nitrides: an overview
- Profa. Luisa González - Instituto de Microelectrónica de Madrid, Madrid, Espanha
In-situ monitoring of strained layers epitaxial growth
- Profa. Maria J.M. Gomes - Universidade do Minho, Departamento de Física, Braga, Portugal
Structural and optical characterization of semiconductor nanocrystals grown by magnetron RF-sputtering
- Prof. Mohamed Henini - Universidade de Nottingham, School of Physics and Astronomy, United Kingdom
Molecular beam epitaxy: physics and technology
- Profa. Mônica Alonso Cotta - UNICAMP, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP
Growth of semiconductor nanostructures by chemical beam epitaxy
- Patrícia L. Souza - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Física, Rio de Janeiro, RJ
Epitaxial growth of III-V semiconductors with planar doping by MOVPE
- Prof. Thomas H. Myers - Universidade de West Virginia, Departamento de Física, EUA
The effect of surface polarity on growth kinetics and doping during plasma-assisted molecular beam
- Prof. Wagner N. Rodrigues - Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física, Belo Horizonte, MG
Growth of InAs quantum dots in Al_xGa_{1-x}As by MBE

As palestras plenárias do evento, sobre crescimento epitaxial de nanoestruturas semicondutoras, foram apresentadas no Anfiteatro Abraão de Moraes do Instituto de Física da USP, por especialistas estrangeiros e brasileiros.

2f - Projetos de Pós-Doutorado:

Concluídos:

Dra. Andréa Dias Quintão

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Supervisor: Prof. Dr. Sylvio Roberto A Canuto

Título do Projeto: Propriedades Estruturais e Espectroscópicas de Moléculas Farmacológicas em Meio Solvente

Bolsa FAPESP - Proc. n° 99/00007-6

Processo USP n° 1999.1.16604.1.6.

Primeira Vigência: 1° de maio de 1999 - 30 de abril de 2000

Segunda Vigência: 1° de maio de 2000 - 31 de janeiro de 2001

Dra. Ângela Burlamaqui Klautau Crispino

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Supervisora: Profa. Dra. Sônia Frota Pessôa

Título do Projeto: Investigação de Propriedades Magnéticas de Sistemas Metálicos Bidimensionais Complexos

Bolsa FAPESP - Proc. n° 00/04924-2

Processo USP n° 2000.1.9398.1.7.

Primeira Vigência: 1° de julho de 2000 - 31 de janeiro de 2001

Dr. João Francisco Justo Filho

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Supervisor: Prof. Dr. Adalberto Fazzio

Título do Projeto: Estudos de Defeitos Extensos em Semicondutores

Bolsa FAPESP - Proc. n° 97/04472-0

Processo USP n° 1997.1.32791.1.0

Vigência: 1° de agosto de 1997 - 30 de março de 2001

Dr. Jose Antonio Huamani Coaquira

Laboratório de Materiais Magnéticos (LMM)

Supervisor: Prof. Dr. Hercílio Rodolfo Rechenberg

Título do Projeto: Estudo das Correlações Magnéticas e Transições de Fase dos Pseudobinários $A(\text{Fe,B})_2$ e seus Hidretos

Bolsa FAPESP - Proc. n° 98/11007-4

Processo USP n° 99.1.11998.1.6

Primeira Vigência: 1° setembro de 1998 - 30 de abril de 2001

Dr. Luis Eduardo Stancato de Souza

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Supervisor: Prof. Dr. Sylvio Roberto A. Canuto

Título do Projeto: Mecânica Estatística de Fluidos sob Alta Pressão.

Simulação pelo Método de Monte Carlo e Desenvolvimento de Equações de Estado

Bolsa FAPESP - Proc. nº 99/10056-4

Processo USP nº 2000.1.6488.1.5

Primeira Vigência: 1º de fevereiro de 2000 - 31 de janeiro de 2001

Segunda Vigência: 1º de fevereiro de 2001 - 31 de julho de 2001

Dr. Marcionílio Teles de Oliveira Silva

Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS)

Supervisor: Prof. Dr. José Roberto Leite

Título do Projeto (3ª Vigência): Estudo de Propriedades Ópticas de GaN dopado com Si, Mn e C, e de Ligas de $Al_x Ga_{1-x}N$ e de $In_{1-x-y} Ga_x Al_y N$

Bolsa FAPESP - Proc. nº 99/07874-7

Processo USP nº 2000.1.3662.1.4

Primeira Vigência: 1º de dezembro de 1999 - 30 de novembro de 2000

Segunda Vigência: 1º de dezembro de 2000 - 30 de novembro de 2001

Prorrogação: 1º de dezembro de 2001 - 31 de janeiro de 2002

Em Andamento:

Dr. César Renato Simenes Silva

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Supervisor: Prof. Dr. Adalberto Fazzio

Título do Projeto: Desenvolvimento de Algoritmos de Escala Múltipla para Materiais

Bolsa FAPESP - Proc. nº 98/11998-0

Processo USP nº 99.1.2397.1.3

Primeira Vigência: 1º de janeiro de 1999 - 31 de dezembro de 1999

Segunda Vigência: 1º de janeiro de 2000 - 31 de dezembro de 2000

Terceira Vigência: 1º de janeiro de 2001 - 31 de dezembro de 2001

Dr. Fábio Coral Fonseca

Grupo de Transição de Fase e Supercondutividade

Supervisor: Prof. Dr. Renato de Figueiredo Jardim

Título do Projeto: Estudo sobre a Separação de Fase em Manganitas com Efeito de Magneto resistência Colossal

Bolsa FAPESP - Proc. nº 01/04231-0

Processo USP nº 2001.1.24510.1.0

Primeira Vigência: 1º julho de 2001 - 30 de junho de 2002

Dr. Jose Antonio Huamani Coaquira

Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas (LESBT)

Supervisores: Prof. Dr. Nei Fernandes de Oliveira Jr. e Prof. Dr. Valmir A.Chitta

Título do Projeto: Caracterização de Estruturas de Semicondutores

Magnéticos Diluídos de Compostos IV-VI Crescidos por MBE
Bolsa FAPESP - Proc. n° 01/02737-3
Processo USP n° 99.1.11998.1.6
Primeira Vigência: 1° junho de 2001 - 31 de maio de 2002

Dra. Lara Kühl Teles

Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS)
Supervisor: Prof. Dr. José Roberto Leite
Título do Projeto: Propriedades Estruturais, Eletrônicas e Termodinâmicas de Ligas Ternárias formadas por Nitretos do Grupo-III
Bolsa FAPESP - Proc. n° 00/12127-5
Processo USP n° 2000.1.18223.1.2
Primeira Vigência: 1° de junho de 2001 - 31 de maio de 2002

Dr. Pedro Paulo de Mello Venezuela

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais
Supervisor: Prof. Dr. Adalberto Fazzio
Título do Projeto: Estrutura Eletrônica e Configuracional de Ligas Silício-Germânio
Bolsa FAPESP - Proc. n° 00/11062-7
Processo USP n° 2000.1.5300.1.3
Primeira Vigência: 1° de fevereiro de 2001 - 31 de janeiro de 2002

Dr. Ramon Valls Martín

Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas (LESBT)
Supervisor: Prof. Dr. Nei Fernandes de Oliveira Jr.
Título do Projeto: Pesquisas em Semicondutores em Baixas Temperaturas e Campos Magnéticos Intensos
Bolsa FAPESP - Proc. n° 01/01895-4
Processo USP n° 2000.1.18222.1.6
Primeira Vigência: 1° maio de 2001 - 30 de abril de 2002

Dr. Ronei Miotto

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais
Supervisor: Prof. Dr. Armando Corbani Ferraz
Título do Projeto: Adsorção e Dissociação de Átomos e Moléculas em Superfícies Semicondutoras e seu Papel como Precursor no Crescimento Epitaxial de Heteroestruturas e na Formação de Interfaces
Bolsa FAPESP - Proc. n° 00/10976-5
Processo USP n° 2000.1.5301.1.0
Primeira Vigência: 1° de janeiro de 2001 - 31 de dezembro de 2001

Dra. Thelma de Souza Berquó

Laboratório de Materiais Magnéticos (LMM)
Supervisora: Profa. Dra. Carmen Silvia de Moya Partiti
Título do Projeto: Caracterização das Propriedades Magnéticas de Turfas do Médio Vale do Rio Paraíba do Sul, Estado de São Paulo: Uma Contribuição da Espectroscopia Mössbauer ao Estudo do Magnetismo Ambiental
Bolsa FAPESP - Proc. n° 00/06066-3

Processo USP nº 2000.1.27112.1.4

Primeira Vigência: 1º de setembro de 2000 - 31 de agosto de 2001

Segunda Vigência: a partir de 1º de setembro de 2001 - (SUSPENSÃO DA VIGÊNCIA ENTRE DEZEMBRO DE 2001 E ABRIL DE 2002, TENDO EM VISTA A REALIZAÇÃO DE UM ESTÁGIO DE 5 MESES NA ESCÓCIA - UK) - término do período: 31 de janeiro de 2003.

Dr. Virgílio de Carvalho dos Anjos

Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS)

Supervisor: Prof. Dr. José Roberto Leite

Título do Projeto: Espectroscopia Raman de Nitretos e de Heteroestruturas Semicondutoras

Bolsa FAPESP: Proc. nº 01/07711-2

Processo USP nº 2002.1.6341.1.6

Primeira Vigência: 1º de setembro de 2001 - 31 de agosto de 2002

Dr. Walter Manuel Orellana Muñoz

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Supervisor: Prof. Dr. Adalberto Fazzio

Título do Projeto: Estudos de Processos em Si/SiO₂

Bolsa FAPESP - Proc. nº 00/00564-1

Processo USP nº 2000.1.9398.1.7.

Primeira Vigência: 1º de abril de 2000 - 31 de março de 2001

Segunda Vigência: 1º de abril de 2001 - 31 de março de 2002

Dr. Xavier Gratens

Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas (LESBT)

Supervisor: Prof. Dr. Valdir Bindilatti

Título do Projeto: New Investigations using Magnetization-Step Method

Bolsa FAPESP - Proc. nº 98/11522-6

Processo USP nº 1999.1.12394.1.4

Primeira Vigência: 1º de dezembro de 1998 - 30 de novembro de 1999

Segunda Vigência: 1º de dezembro de 1999 - 30 de novembro de 2000

Terceira Vigência: 1º de janeiro de 2001 - 31 de dezembro de 2001

2g - Doutorados:

Concluídos:

“Efeitos de Tamanho finito e de Interfaces em Super-Redes InP/In_{0.53}Ga_{0.47}As”

Luciana Kazumi Hanamoto

Fonte Financiadora: CAPES

Orientador: André Bohomoletz Henriques

Data: 14.12.2001

“Efeito Kerr Magneto-Óptico Espectral e Sperimagnetismo de Filmes Amorfo de Terra-Rara Co”

Adriana P. B. Tufaile

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Antônio Domingues dos Santos

Data: 28.05.2001

“Investigação Magneto-Óptica das Propriedades Estruturais Eletrônicas de Interfaces em Poços Quânticos”

Ademir Cavalheiro

Fonte Financiadora: CAPES/PICD (atualmente sem bolsa)

Orientadora: Euzi Conceição Fernandes da Silva

Data: 23.11.2001

“Propriedades Eletrônicas e Estruturais de Compostos Intermetálicos C11_b”

Luis Alberto Terrazos Javier

Fonte Financiadora: CNPq

Orientadora: Helena Maria Petrilli

Data: 18.04.2001

“Propriedades Estruturais, Eletrônicas e Termodinâmicas dos Nitretos do Grupo-III e de suas Ligas”

Lara Kühl Teles

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientadora: Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Data: 10.05.2001

“Estrutura de Bandas de Heteroestruturas Semicondutoras Dopadas Tipo-p”

Sara Cristina Pinto Rodrigues

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientadora: Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Data: 28.06.2001

“Propriedades Elétricas e Vibracionais dos Nitretos do Grupo III”

Jose Rafael León Fernandez

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Valmir Antônio Chitta

Data: 10.12.2001

Em Andamento:

“Propriedades Eletrônicas e Estruturais de Membranas Lipídicas e suas Interações com Nanocontatos Metálicos”

Fábio Bretas de Freitas

Fonte Financiadora: sem bolsa

Orientador: Adalberto Fazzio

“Estudo Teórico da Reação de Moléculas de O₂ com a Superfície de SiC”

Frederico Dutilh Novaes

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Adalberto Fazzio

“Propriedades Eletrônicas e Estruturais em Si/Ge e Si/Si₃N₄ com Temperaturas Finitas”

Gustavo Martini Dalpian
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Adalberto Fazzio

“Crescimento e Caracterização de Pontos Quânticos de In_xGa_{1-x}As Verticalmente Alinhados para Aplicação como Meio Ativo em Estruturas do Tipo Laser”

Marcelo Jacob da Silva
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Alain André Quivy

“Estudo da Segregação de Índio durante o Crescimento Epitaxial por Feixe Molecular de Camadas Tensionadas de InGaAs sobre Substratos de GaAs”

Sandro Martini
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Alain André Quivy

“Espectroscopia a Nível Atômico usando um Microscópio de Tunelamento”

Tomas Erikson Lamas
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Alain André Quivy

“Estados de Tamm em Super-Redes Semicondutoras Dopadas”

Ricardo Faveron de Oliveira
Fonte Financiadora: CAPES
Orientador: André Bohomoletz Henriques

“Estudo Estrutural, Magnético e Magneto-Óptico de Filmes Finos de Pt_y(Fe_{1-x}Co_x)_{1-y}”

Alessandro Martins
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Antônio Domingues dos Santos

“Estudo de Materiais Magnéticos Através de Microscopia Óptica de Varredura em Campo Próximo, em Modo Magneto-Óptico”

Carlos Eduardo Santi
Fonte Financiadora: sem bolsa
Orientador: Antônio Domingues dos Santos

“Estudo do Comportamento Magneto-óptico de Redes de Difração Magnéticas”

Jeroen Schoenmaker
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Antônio Domingues dos Santos

“Estudo de Superfícies e Interfaces de Semicondutores Amorfos: c-Si/a-Si, c-Ge/a-Ge e a-Si/a-Ge”

Marcilei Aparecida Guazzelli da Silveira

Fonte Financiadora: sem bolsa

Orientador: Antônio José Roque da Silva

“Magnetização Remanescente em Sistemas Antiferromagnéticos Diluídos”

Zulmara Virginia de Carvalho

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Carlos Castilla Becerra

“Espectroscopia Mössbauer Aplicada ao Estudo de Cristalização de Ligas Amorfas”

Denis Rezende de Jesus

Fonte Financiadora: CNPq

Orientadora: Carmen Silvia de Moya Partiti

“Caracterização Óptica de Heteroestruturas Semicondutoras”

Marcos Frizzarini

Fonte Financiadora: CNPq (atualmente sem bolsa)

Orientadora: Euzi Conceição Fernandes da Silva

“Transporte Quantitativo em Poços Parabólicos Largos”

Cássio Sanguini Sérgio

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Guennadii Michailovitch Gusev

“Estudo da Dinâmica de Caos em um Gás de Elétrons Tridimensional de Alta Mobilidade”

Nilo Mauricio Sotomayor Choque

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Guennadii Michailovitch Gusev

“Estudo do Diagrama de Fase da Liga Al-Fe-Mo a partir de Cálculos de Estrutura Eletrônica de Primeiros Princípios”

Pablo Guillermo Gonzales Ormeño

Fonte Financiadora: sem bolsa

Orientadora: Helena Maria Petrilli

“Transições Metamagnéticas em Compostos $R_6Fe_{14-x}Al_x$ (R = Terras-Raras): Propriedades Magnéticas e de Transporte”

Shintaro Jonen

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Hercílio Rodolfo Rechenberg

“Propriedades Vibracionais de Nitretos do Grupo III e de suas Ligas”

Adriano Manoel dos Santos

Fonte Financiadora: CAPES

Orientador: José Roberto Leite

“Propriedades Ópticas e de Transporte de Pontos Quânticos Auto-Organizados em Ligas Semicondutoras de InGaN”

David Gregório Pacheco Salazar

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: José Roberto Leite

“Propriedades Ópticas dos Nitretos GaN, InN e das Heteroestruturas Semicondutoras InGaN/GaN”

Ricardo Trentin

Fonte Financiadora: CNPq (atualmente sem bolsa)

Orientador: José Roberto Leite

“Estudo das Propriedades Estruturais, Eletrônicas e Ópticas em Semicondutores HgI₂”

Frederico Ayres de Oliveira Neto

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Lucy Vitória Credidio Assali

“Propriedades Eletrônicas e Estruturais de Impurezas Relacionadas com Metais de Transição em SiC”

Karina de Oliveira Barbosa

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Lucy Vitória Credidio Assali

“Estabilidade de Defeitos Nativos e Impurezas em Nitreto de Boro”

Luis Eugênio Ramos

Fonte Financiadora: FAPESP (atualmente sem bolsa)

Orientadora: Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

“Propriedades Estruturais, Termodinâmicas e Eletrônicas de Ligas Quaternárias de Nitretos do Grupo-III”

Marcelo Marques

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientadora: Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

“Propriedades Intergranulares de Manganitas”

Alessandro de Souza Carneiro

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Renato de Figueiredo Jardim

“Transição Metal-Isolante em Óxidos de Terra-Rara e Ni”

Márcia Tsuyama Escote

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Renato de Figueiredo Jardim

“Efeitos de Solvente em Estados Excitados Moleculares e em Fluorescência”

Eduardo Augusto Rissi

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

“Estudo de Propriedades Ópticas e Elétricas de Moléculas em Meio Líquido”

Eudes Eterno Fileti

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

“Teoria de Perturbação Termodinâmica. Reações Moleculares em Fase Líquida”

Roberto Rivelino de Melo Moreno

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

“Estudos Ab Initio de Espectroscopia Molecular”

Valdemir Eneias Ludwig

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

“Estudo Experimental em Semicondutores Magnéticos e Semicondutores Magnéticos Diluídos do Tipo II-III₂-VI₄”

John Carlos Mantilla Uchoa

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Valdir Bindilatti

“Magneto óptica em Heteroestruturas Semicondutoras”

Odille Cue Noriega

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Valmir Antônio Chitta

“Estudo das Propriedades Magnéticas e Estruturais de Ímãs Permanentes de Terra-Rara Metal de Transição”

Regina Keiko Murakami

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Valquíria Villas Boas Gomes Missell

2h - Mestrados:

Concluídos:

“Filmes Finos de SmCo e sua Caracterização Magnética e Microestrutural”

Fernando Mário Rhen Filho

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Frank Patrick Missell

Data: 24.04.2001

“Propriedades Eletrônicas das Ligas Al_xGa_{1-x}N e In_xGa_{1-x}N e da Impureza Aceitadora de Carbono”

Marcelo Marques

Fonte Financiadora: FAPESP
Orientadora: Luísa Maria Ribeiro Scolfaro
Data: 22.02.2001

“Preparação e Caracterização de Compostos Pr Ba₂ Cu₃ O_{7-x}”

Vinicius Alegreti Meza
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Renato de Figueiredo Jardim
Data: 03.05.2001

“Estudo Teórico das Propriedades Espectroscópicas do Complexo Guanina-Citosina”

Valdemir Eneias Ludwig
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto
Data: 06.04.2001

“Interações de troca em Cd_{1-x}Mn_xTe”

Henady Malarenko Júnior
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Valdir Bindilatti
Data: 01.06.2001

Em Andamento:

“Estudo da Dinâmica de Difusão de Ge em Si(100) através do Esquema de Car-Parrinello com Temperatura”

José Carrijo de Faria Jr.
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Adalberto Fazzio

“Simulação da Auto-Difusão de Germânio na Liga de Silício-Germânio”

Fábio Campos Poderoso
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Antônio José Roque da Silva

“Estudo Teórico de Transição de Fase na Liga Si_{1-x}Ge_x sob Pressão”

Renato Borges Campos
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Antônio José Roque da Silva

“Espectroscopia Mössbauer Aplicada ao Estudo de Minerais”

Daniel Ribeiro Franco
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientadora: Carmen Silvia de Moya Partiti

“Estudo das Propriedades Ópticas de Pontos Quânticos de InAs Auto-organizados e Efeitos de Muitos Corpos”

Celso de Araújo Duarte

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Eliermes Arraes Meneses

Co-orientadora: Euzi Conceição Fernandes da Silva

“Investigação da Estrutura Eletrônica de Poços Quânticos com Dopagem Planar na Barreira Utilizando o Efeito Shubnikov - de Haas”

Sérgio Takimoto Maurício

Fonte Financiadora: sem bolsa

Orientadora: Euzi Conceição Fernandes da Silva

“Superfícies Metálicas Através de Cálculos Ab Initio”

Andrei Reyes Huamantínco

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientadora: Helena Maria Petrilli

“Interação de Quadrupolo Nuclear em Complexos Envolvendo Metais”

Sandro Pereira Vilela

Fonte Financiadora: CNPq

Orientadora: Helena Maria Petrilli

“Construção de um Detector de Elétrons para Efeito Mössbauer por Retroespalhamento”

Renato Cohen

Fonte Financiadora: sem bolsa

Orientador: Hercílio Rodolfo Rechenberg

“Propriedades Ópticas de Poços Quânticos de GaN/InGaN/GaN na Fase Cúbica”

Ângela Maria Ortiz de Zevallos Marquez

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: José Roberto Leite

“Estudos de Propriedades Estruturais e Eletrônicas da Alfaciclodextrina. Comparação entre Métodos Clássicos e Quânticos”

Herbert de Castro Georg

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Kaline Rabelo Coutinho

“Propriedades Físicas de Impurezas de Metais de Transição em Diamante”

Rolando Larico Mamani

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Lucy Vitória Credidio Assali

“Construção ao Projeto e Construção de Suporte Criogênico a uma Antena Gravitacional Esférica Super-Resfriada”.

Sergio Turano de Souza
Financiadora: CNPq
Orientador: Nei Fernandes de Oliveira Junior

“Controle Microestrutural e Magneto Resistência Intergranular em Manganitas $\text{La}_{0.7-x}\text{Y}_x\text{Cq}_{0.3}\text{MnO}_3$ ($0.0 \leq x \leq 0.5$)”
José Antonio Souza
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Renato de Figueiredo Jardim

“Propriedades Eletrônicas de um Inibidor Enzimático e sua Interação com a Enzima”
Daniel Rodrigo Ferreira Trzesniak
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

“Utilizando Monte Carlo para Estudar Mudanças Conformacionais de Sistemas Moleculares”
Ivam Pereira Mendes Neto
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

“Estudo de Propriedades Estruturais e Eletrônicas de Piridina em Solução Aquosa”
Thaciana Valentina Malaspina Fileti
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

“Interações de Troca entre Vizinhos Distantes em Semicondutores Magnéticos Diluídos”
Rafael Alejandro Cajacuri Merino
Fonte Financiadora: sem bolsa
Orientador: Valdir Bindilatti

2i - Projetos de Iniciação Científica:

“Preparação e Caracterização de Pontas para um Microscópio Óptico de Varredura em Campo Próximo”
Leonardo N. Nóbrega
Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC
Orientador: Antônio Domingues dos Santos
Ano: 2001

“Análise Estrutural de Materiais Amorfos Utilizando o Método de Monte Carlo Reverso”
Edwin Hobi Júnior
Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC
Orientadora: Antônio José Roque da Silva

Ano: 2001

“Propriedades Estruturais de Sólidos Obtidas Através de Pseudopotenciais”

Ferenc Diniz Kiss

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientador: Armando Corbani Ferraz

Ano: 2001

“Espectroscopia Mössbauer Aplicada ao Estudo de Propriedades Eletrônicas e Magnéticas dos Sólidos”

Fábio Oliveira Jorge

Fonte Financiadora: sem bolsa

Orientadora: Carmen Silvia de Moya Partiti

Ano: 2001

“Desenvolvimento de um viscômetro de fio vibrante para medições de ultras baixas temperaturas em campos magnéticos super intensos”

Marcelo Scolaro Morlotti

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientador: Ewout Ter Haar

Ano: 2001

“Introdução à Estrutura Eletrônica de Metais”

Alexandre Martins Melo

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientadora: Helena Maria Petrilli

Ano: 2001

“Partículas Nanométricas de Ferritas Preparadas por Encapsulamento Polimérico”

Ivanine Estrella Fachini Vieira

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientador: Hercílio Rodolfo Rechenberg

Ano: 2001

“Pontos Quânticos Auto-organizados em Ligas Semicondutoras”

Renato de Carvalho

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientador: José Roberto Leite

Ano: 2001

“Obtenção e Processamento de Dados de Experiências de Fotorefletância em Semicondutores de Gap Largo”

Tiago Eziquiel Corrêa

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientadora: Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Ano: 2001

“Montagem e calibração de uma célula para medidas de transporte sob pressão”

Solange de Andrade

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Renato de Figueiredo Jardim

Ano: 2001

3 - ATIVIDADES DE EXTENSÃO E GESTÃO ACADÊMICA

3a - Atividades Administrativas Institucionais:

Adalberto Fazzio

Membro da Congregação do IFUSP.

Membro do Conselho do Departamento.

Membro do Conselho Técnico Administrativo do IFUSP (mandato: 16.10.1998 a 15.10.2002).

Membro Suplente do Instituto de Física junto ao Conselho Universitário.

Vice-Diretor do Instituto de Física da USP (mandato: 16.10.1998 a 15.10.2002).

André Bohomoletz Henriques

Membro do Conselho do Departamento (mandatos: de 16.09.1999 a 15.09.2001 e de 21.09.2001 a 20.09.2003).

Antônio Domingues dos Santos

Presidente da Comissão de Avaliação de Disciplinas do IFUSP.

Suplente do Representante do DFMT na Comissão de Graduação do IFUSP.

Antônio José Roque da Silva

Coordenador do Setor de Videoteca do Instituto de Física da USP (a partir de agosto de 1999).

Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 03.03.1999 a 02.03.2001).

Representante do Departamento junto à Comissão de Biblioteca do IFUSP (mandato: 29.06.2000 a 28.06.2002).

Armando Corbani Ferraz

Membro da Câmara de Avaliação da Pró-Reitoria de Pós-Graduação da USP (a partir de dezembro de 1999).

Membro da Congregação do IFUSP.

Membro do Conselho de Pós-Graduação da Universidade de São Paulo (a partir de dezembro de 1999).

Membro do Conselho do Departamento.

Membro do Conselho Técnico Administrativo do IFUSP (mandatos: 09.12.1999 a 08.12.2001 e de 09.12.2001 a 08.12.2003).

Presidente da Comissão de Pós-Graduação do IFUSP (mandatos: 09.12.1999 a 08.12.2001 e de 09.12.2001 a 08.12.2003).

Armando Paduan Filho

Membro da Congregação do IFUSP (mandato: de 27.05.1999 a 26.05.2001).
Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 21.09.2001 a 20.09.2003).
Representante do Departamento na Comissão de Consultorias e Convênios.
Representante dos Professores Associados no Conselho do Departamento.
Suplente do Representante dos Professores Associados na Congregação do IFUSP.

Carlos Castilla Becerra

Membro da Congregação do IFUSP.
Membro do Conselho do Departamento.
Representante do Departamento junto à Comissão de Pesquisa do IFUSP (mandato: de 22.11.2001 a 21.11.2003).

Carlos Henrique Westphal

Coordenador da Comissão de Avaliação de Disciplinas.
Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 03.03.2001 a 02.03.2003).
Membro da Congregação do IFUSP (mandato: de 30.05.2001 a 29.05.2003).
Membro da banca de Física da Comissão de Seleção de Oficiais da Marinha para ingresso na escola Politécnica da USP.
Representante do IFUSP na Comissão da Pró-Reitoria de Extensão Universitária para “Planejamento de Currículos para Oficiais de Bombeiros”.

Carmen Silvia de Moya Partiti

Membro da Congregação do IFUSP (mandatos: de 27.05.1999 a 26.05.2001 e de 31.05.2001 a 30.05.2003).
Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 03.03.2001 a 02.03.2003).
Representante do Grupo de Espectroscopia Mössbauer junto à Comissão de Radioproteção do IFUSP, a partir de agosto de 1996, até o presente.
Representante do Instituto de Física da USP junto à Comissão Coordenadora do Curso de Licenciatura do Instituto de Matemática e Estatística da USP, a partir de março de 1998.

Euzi Conceição Fernandes da Silva

Membro da Congregação do IFUSP (mandato: de 31.05.2001 a 30.05.2003).
Membro do Conselho do Departamento (mandatos: de 03.03.1999 a 02.03.2001 e de 03.03.2001 a 02.03.2003).

Frank Patrick Missell

Membro da Congregação do IFUSP.
Membro do Conselho do Departamento.
Membro Suplente da Comissão de Pesquisa do IFUSP (mandato: de 22.11.1999 a 21.11.2001)
Presidente do Comitê de Gestão do Laboratório de Análise de Materiais por Feixe Iônico (LAMFI).

Gerardo Fabián Goya

Membro da Congregação do IFUSP (mandato: de 31.05.2001 a 30.05.2003).

Guennadii Michailovich Gusev

Membro Suplente da Comissão da Biblioteca do IFUSP (mandato: de 04.04.2000 a 03.04.2002).
Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 21.09.2001 a 20.09.2003).

Helena Maria Petrilli

Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 21.09.2001 a 20.09.2003).

Hercílio Rodolfo Rechenberg

Chefe do Departamento (mandato: de 23.02.2000 a 22.02.2002).

Membro da Congregação do IFUSP.

Membro do Conselho do Departamento.

Membro do Conselho Técnico Administrativo do IFUSP (mandato: de 23.02.2000 a 22.02.2002).

José Roberto Leite

Membro da Comissão de Legislação e Recursos (CLR) junto à Universidade de São Paulo (mandato: de 28.03.2000 a 27.03.2001).

Membro da Congregação do IFUSP.

Membro do Conselho do Departamento.

Membro Titular da Academia Brasileira de Ciências.

Membro Titular da Academia de Ciências do Estado de São Paulo.

Presidente da Federação Latinoamericana das Sociedades de Física (FeLaSoFi) (mandato: de 2001 a 2004).

Presidente da Sociedade Brasileira de Física (SBF) (mandato: de 07.2001 a 07.2003).

Representante da Congregação do IFUSP junto ao Conselho Universitário (mandatos: de 25.05.1999 a 24.05.2001 e de 30.08.2001 a 31.08.2003).

Suplente do Presidente da Comissão de Pesquisa do IFUSP (mandato: de 11.11.1999 a 14.11.2001).

Kazunori Watari

Coordenador da Sala Pró-Aluno do IFUSP.

Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 03.03.1999 a 02.03.2001).

Representante do Departamento junto à Comissão de Informática do IFUSP (mandato: de 22.08.1999 a 21.08.2001).

Lucy Vitória Credidio Assali

Membro da Congregação do IFUSP (mandato: de 31.05.2001 a 30.05.2003).

Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 21.09.2001 a 20.09.2003).

Representante do Departamento junto à Comissão de Graduação do IFUSP.

Suplente do Presidente da Comissão de Graduação do IFUSP (mandato: de 04.04.2001 a 03.04.2003).

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Membro Suplente da Congregação do IFUSP (mandato: de 05.05.1999 a 04.05.2001).

Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 03.03.01 a 02.03.03).

Membro Titular da Congregação do IFUSP (mandato: de 31.05.2001 a 30.05.2003).

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

Coordenador do Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas.

Membro da Congregação do IFUSP.

Membro do Conselho do Departamento.

Suplente do Chefe do Departamento (primeiro mandato: de 23.02.2000 a 22.02.2002).

Renato de Figueiredo Jardim

Membro do Corpo Editorial da Revista Materials Research.
Membro da Congregação do IFUSP (mandato: de 31.05.2001 a 30.05.2003).
Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 16.09.1999 a 15.09.2001).
Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 21.09.2001 a 20.09.2003).

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Membro da Congregação do IFUSP.
Membro do Conselho do Departamento.

Valdir Bindilatti

Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 03.03.1999 a 02.03.2001).
Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 21.09.2001 a 20.09.2003).
Membro Suplente da Congregação (mandato: de 30.05.2001 a 29.05.2003).
Representante do Departamento junto à Comissão de Informática do IFUSP (mandato: de 22.08.1999 a 21.08.2001 e de 22.08.2002 a 21.08.2004)
Representante Suplente do Departamento junto à Comissão de Pesquisa do IFUSP (mandato: de 22.11.2001 a 21.11.2003).

Valquíria Villas Boas Gomes Missell

Membro da Comissão de Coordenação de Cursos do Instituto de Química da USP.
Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 03.03.1999 a 02.03.2001).

3b - Assessorias e Consultorias (inclusive arbitragens para revistas):

Adalberto Fazzio

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, FAPERJ, FACEPE, CNPq e CAPES.
Arbitragem para: Revista Brasileira de Física, Physical Review B, Phys. Rev. Lett., Solid State Communications, International Journal Quantum Chemistry, Material Science Forum, Journal of Physics and Chemistry of Solids e Proceedings da Escola Brasileira de Semicondutores.

André Bohomoletz Henriques

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, CNPq, CAPES, FACEPE e FAPEMIG.
Arbitragem para: Journal of Applied Physics, Physica B, Thin Solid Films e Brazilian Journal of Physics.

Antônio Domingues dos Santos

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.

Antônio José Roque da Silva

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.
Arbitragem para: Brazilian Journal of Physics e Int. J. Mod. Phys. B.

Armando Corbani Ferraz

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, CNPq, CAPES, FAPEMIG e MCT.

Arbitragem para: Applied Phys. Lett, Applied Surface Science, Brazilian Journal of Physics, International Journal of Quantum Chemistry, Journal of Chem. Phys., Journal of Physics: Condensed Matter, Physical Review B, Phys. Rev. Lett., Solid State Communications e Surface Science.

Armando Paduan Filho

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.

Arbitragem para: Journal of Magnetism and Magnetic Materials e International Journal of Modern Physics B.

Carlos Castilla Becerra

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, FACEPE, CNPq, CAPES, FINEP e Ministério da Ciência e Tecnologia.

Carmen Silvia Moya Partiti

Arbitragem para: Materials Science Forum e Journal of Magnetism and Magnetic Materials.

Euzi Conceição Fernandes da Silva

Assessoria *ad hoc* prestada: CNPq e FAPESP.

Consultoria para: Physical Review, Modern Physics Letters B, International Journal of Modern Physics B e Thin Solid Films.

Ewout Ter Haar

Assessoria *ad hoc* prestada: CNPq.

Frank Patrick Missell

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, CNPq, CAPES e FAPDF.

Árbitro do Journal of Applied Physics, Journal of Magnetism and Magnetic Materials e Thin Solid Films.

Coordenação da Área de Física da FAPESP.

Guennadii Michailovitch Gusev

Assessoria científica prestada: FAPESP e CNPq.

Consultoria para o Physical Review B.

Helena Maria Petrilli

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, CNPq e ANPCyT (Argentina).

Arbitragem para: o Journal of Magnetism and Magnetic Materials - JMMM, Hyperfine Interactions, Z. Naturforschung, Physica Status Solidi, Physical Review B, Physical Review Letters e Acta Polonia.

Hercílio Rodolfo Rechenberg

Assessoria *ad hoc* prestada: CNPq, CAPES, MCT, FAPESP, FAPEMIG, FAPERGS, FAPDF, FAPDF e UNIP.

Gerardo Fabián Goya

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP.

Arbitragem para a Physica B, J. Magn. Magn. Mater., Physica Status Solidi, Journal of Solid State Chemistry, Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials, Mat. Sci. Fórum, Brazilian Journal of Physics e Materials Letters.

José Roberto Leite

Assessorias científicas prestadas à FAPESP, CAPES, CNPq, FAPERJ, FAPEMIG, FINEP, FUEL, FAPERGS, FAPEAL, UNICAMP, UFRGS, Secretaria da Ciência, Tecnologia e Desenvolvimento Econômico do Estado de São Paulo e MCT.

Assessoria científica 'ad hoc' da Coordenadoria de Pesquisa e Pós-Graduação da Universidade Estadual de Londrina, Londrina, PR., etc.

Consultorias para revistas nacionais e internacionais na área da Física: Phys. Review, Phys. Rev. Letters, Solid State Commun., Appl. Phys. Lett., Mod. Phys. Lett. B, Intern. J. Mod. Phys. B, Brazilian Journal of Physics, Physica Status Solidi, Revista Estudos Arte/Tecnologia (PUC/GO), etc.

Kazunori Watari

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP.

Lucy Vitória Credidio Assali

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.

Arbitragem para: Brazilian Journal of Physics, Physical Review, International Journal of Quantum Chemistry, Material Science Forum e Physical Review Letters.

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.

Arbitragem para: Journal Physics Condens. Matter, Journal of Applied Physics, Applied Physics Letters, Nanotechnology, physica status solidi, Braz. J. Phys., Physical Review Letters, Physical Review B, Physica B, Physica E, Semicond. Science and Technol. e Superlat. and Microst.

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, FINEP e CNPq.

Renato de Figueiredo Jardim

Assessoria *ad hoc* prestada: FACEPE, FAPESP, CAPES, FUNDUNESP, NSF, CNPq, MCT e FINEP.

Arbitragem para: Applied Physics A, Applied Physics Letters, Brazilian Journal of Physics, Journal of Applied Physics, Journal of Macromolecular Science - Pure and Applied Chemistry, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Materials Research, Physica C, Physica Status Solidi (b), Physics Letters A, Physical Review B e Solid State Communications.

Sonia Frota Pessôa

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, FAPERJ, FAPERGS e CNPq.

Arbitragem para: Physical Review B e Physical Review Letters.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, CNPq, CAPES, FAPEMIG, FACEPE, FAPDF, FAPERGS, FINEP, CONICYT (Uruguai) e Third World Academy of Sciences.

Arbitragem para: International Journal Quantum Chemistry, Theochem - Journal of Molecular Structure, Physical Review A, Physical Review B, Physics Letters A, Brazilian Journal of Physics, Journal of Chemical Physics, Journal of the American Chemical Society, Journal of the Chemical Society (Perkins Transaction), Journal of the Brazilian Chemical Society, Computer Physics Communications, Química Nova, Revista Brasileira de Ensino de Física, Modern Physics Letters e Asian Journal of Physics.

Valdir Bindilatti

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.

Arbitragem: Physics Status Solidi e J. Magn. Magn Matter.

Valquíria Villas Boas Gomes Missell

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP a partir de agosto de 1996.

ANPCyT (Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica) da Argentina, a partir de fevereiro de 1998.

Arbitragem para: Materials Research e J. Magn. Magn Matter.

3c - Cursos, Palestras, Mesas-Redondas e “Invited talks”:

Adalberto Fazzio

“Nanotubos: Os Diamantes Negros do Futuro” - Mini-Curso, Curso de Verão - IFUSP’2001, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (de 30 de janeiro a 02 de fevereiro de 2001).

“Projetando Materiais: Os Alquimistas Virtuais Estão Chegando” - Conferência - 53ª Reunião Anual da SBPC, Universidade Federal da Bahia, Salvador, BA (de 13 a 18 de julho de 2001).

“Nanotubos de Carbono: os Diamantes do Futuro” - Palestra - VI Encontro Sergipano de Física, São Cristóvão, SE (de 23 a 27 de julho de 2001).

“Projetando Materiais: Os Alquimistas Virtuais Estão Chegando” - Palestra - Escola de Inverno do VI Encontro Sergipano de Física, São Cristóvão, SE (de 23 a 27 de julho de 2001).

Antônio Domingues dos Santos

“Desenvolvimento de um Microscópio Óptico de Varredura em Campo Próximo” - Seminário do Laboratório de Filmes Finos - Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (22 de maio de 2001).

Antônio José Roque da Silva

“Física no Computador” - Workshop, Curso de Verão - IFUSP’2001, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (07 de fevereiro de 2001).

“Estágios Iniciais de Crescimento de Ge em Si(100): Teoria x Experimentos” - Seminário do Departamento de Física Experimental - Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (29 de março de 2001).

“Áreas Interdisciplinares” - Mesa-Redonda - Primeira Semana da Física do IFUSP, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (10 de outubro de 2001).

Armando Corbani Ferraz

“Zn-induced Features at the GaAs (110) Surface: A First-Principles Study” - Invited talk, II International Seminar on Semiconductor Surface Passivation - SSP’2001, Ustron, Polônia (de 10 a 13 de setembro de 2001).

Frank Patrick Missell

“Exchange-Coupled Magnets and Films” - Seminário, Read-Rite Corporation, Fremont, CA, EUA (de 06 a 13 de abril de 2001).

Guennadii Michailovich Gusev

“Propriedades de Transporte de Elétrons em Gás Quasi-Tridimensional (Poço Quântico Parabólico Largo)” - Seminário, Universidade Federal de São Carlos, Departamento de Física, São Carlos, SP (07 de novembro de 2001).

Helena Maria Petrilli

“Les Methodes Ab Initio de Calculs de Structure Electronique Application a L’Etude des Proprietes Locales dans les Metaux” - Mini-Curso, Laboratoire de Métallurgie Physique et Génie des Matériaux, Université des Sciences et Technologies de Lille, Lille, França (de 29 de janeiro a 05 de fevereiro de 2001).

“Phase Diagrams of FeAl Using Ab Initio Electronic Structure Calculations” - Apresentação Oral, International Conference on Applied Density Functional Theory 2001, Vienna, Áustria (17 de janeiro de 2001).

“Probing the Metal Coordination Through Electric Field Gradients in Metal Complexes for Biological Applications: an Ab Initio Study” - Seminário, Università degli Studi di Modena, Modena, Itália (18 de janeiro de 2001).

“Hyperfine Interactions: Contributions from *Ab Initio* Calculations” - Palestra Convidada, XXXVI Zakopane School of Physics - International Symposium on Condensed Matter Studies by Nuclear Methods, Zakopane, Polônia (18 de maio de 2001).

“Contributions from *Ab Initio* EFG Calculations” - Palestra Convidada, XVI International Symposium on Nuclear Quadrupole Interactions, Hiroshima, Japão (9 a 14 de setembro de 2001).

José Roberto Leite

“Física da Matéria Condensada: Semicondutores e Fluidos Complexos” - Palestra, Curso de Verão - IFUSP'2001, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (05 e 06 de fevereiro de 2001).

“Uma Viagem Fantástica: da Descoberta do Elétron ao Mundo do Efeito Hall Quântico e da Moderna Era da Informação” - Aula Inaugural, Semana de Recepção aos Calouros, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (de 19 a 23 de fevereiro de 2001).

“Nanociência e Nanotecnologia de Semicondutores no Brasil” - Palestra, Colóquio Franco-Brasileiro de Micro e Nanotecnologia, Instituto Nacional de Tecnologia da Informação, Campinas, SP (25 de abril de 2001).

“Light Emission Process in GaN/InGaN/GaN Quantum Wells” - Apresentação Oral, XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, São Lourenço, MG (de 15 a 19 de maio de 2001).

“O Impacto da Nanociência e Nanotecnologia de Semicondutores do Mundo Moderno” - Palestra, XI Semana da Física, Campo Grande, MS (05 e 06 de setembro de 2001).

“Horizontes da Política Científica Nacional” - Mesa-Redonda, XIX Encontro de Físicos do Norte e Nordeste” - XIX EFNNE , Natal, Rio Grande do Norte (29 de outubro a 01 de novembro de 2001).

“O Impacto da Nanociência e Nanotecnologia na Microeletrônica Moderna” - Apresentação Oral, VI Semana da Física, Londrina, Paraná (de 12 a 14 de novembro de 2001).

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

“Phase Separation in Group-III Nitride alloys” - Palestra Convidada, International Workshop on Physics of Light-Matter Coupling in Nitrides - PLMCN-1, Roma, Itália (de 21 de setembro a 01 de outubro de 2001).

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

“Detecção de ondas gravitacionais: O projeto do detector Mario Schenberg” - Colóquio, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (08 de março de 2001).

Renato de Figueiredo Jardim

“Propriedades Gerais de Óxidos de Terras Raras e Metais de Transição” - Colóquio, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, RS (janeiro de 2001).

“Supercondutores Óxidos” - Colóquio, Instituto de Física da Universidade de São Paulo, São Carlos, SP (21 de junho de 2001).

“Supercondutividade em Altas Temperaturas” - Colóquio, Universidade São Francisco, Itatiba, SP (novembro de 2001).

Sylvio Roberto Accioly Canuto

“Solvent Effects on the Electronic Properties of Molecules Using a QM/MM Monte Carlo Approach” - Seminário, Royal Institute of Technology, Estocolmo, Suécia (30 de janeiro de 2001).

“Theoretical Studies of Solvent Effects Using Monte Carlo/Quantum Mechanics” - Seminário, Universidade de Uppsala, Uppsala, Suécia (02 de fevereiro de 2001).

“Estrutura Eletrônica de Líquidos” - Seminário, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG (19 de outubro de 2001).

“Estrutura Eletrônica de Líquidos” - Seminário, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ (outubro de 2001).

3d - Concursos Realizados:

CONCURSO DE LIVRE-DOCÊNCIA

1. Candidato: Prof. Dr. Guennadi Michailovich Gusev

Período: de 29 a 31.01.2001

Homologação: 29.03.2001

Disciplinas:

Introdução à Física do Estado Sólido I (FMT814)

Introdução à Física do Estado Sólido II (FMT835)

Banca:

Antonio Martins Figueiredo Neto (IFUSP)

Eliermes Arraes Menezes (UNICAMP)

Israel Jacob Rabin Baumvol (UFRGS)

José Roberto Leite (IFUSP)
Nelson Studart Filho (UFSCar)

2. Candidato: Prof. Dr. Antônio Domingues dos Santos

Período: de 05 a 07.12.2001

Homologação: 20.12.2001

Disciplinas:

Introdução à Física do Estado Sólido I (FMT814)

Introdução à Física do Estado Sólido II (FMT835)

Banca:

Carlos Castilla Becerra (IFUSP)

Fernando Luiz de Araújo Machado (UFPE)

Marcelo Knobel (UNICAMP)

Mário José de Oliveira (IFUSP)

Mário Norberto Baibich (UFRGS)

CONCURSO DE PROFESSOR TITULAR

1. DEPARTAMENTO DE FÍSICA DOS MATERIAIS E MECÂNICA

Candidatos:

Prof. Dr. André Bohomoletz Henriques

Prof. Dr. Armando Corbani Ferraz

Prof. Dr. Renato de Figueiredo Jardim

Candidato indicado:

Prof. Dr. Armando Corbani Ferraz

Período: de 22 a 23.05.2001

Homologação: 31.05.2001

Disciplinas:

Introdução à Física do Estado Sólido I (FMT814)

Introdução à Física do Estado Sólido II (FMT835)

Banca:

Helion Vargas (UENF)
Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP)
João Alziro Herz da Jornada (UFRGS)
Luiz Guimarães Ferreira (IFUSP)
Luiz Nunes de Oliveira (IFSC/USP)

3e - Participação em Comissões Julgadoras no IFUSP:

Adalberto Fazio

Lara Kühl Teles (Tese de Doutorado).

Título: “Propriedades estruturais eletrônicas e termodinâmicas dos nitretos do grupo-III e de suas ligas”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Luísa Maria R. Scolfaro (orientadora), Adalberto Fazio, Mário José de Oliveira, Carlos Lenz César (UNICAMP) e José Luiz A. Alves (FUNREI).

Data: 10 de maio de 2001.

Mário Sandro Francisco da Rocha (Tese de Doutorado).

Título: “Processos de relaxação dielétrica em vidros basal irradiados com Raio X”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Walter Maigon Pontuschka (orientador), Adalberto Fazio, José Carlos Sartorelli, Alaíde P. Mammana (INTI) e José Roberto Martinelli (IPEN).

Data: 14 de maio de 2001.

Processo Seletivo junto ao Departamento de Física Matemática (Primeira Etapa).

Banca: Mário José Oliveira (DFGE), Elcio Abdalla (DFMA), Antonio Martins Figueiredo Neto (DFEP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (DFMT), Iberê Luiz Caldas (DFAP), Alinka Lépine (DFNC) e Adalberto Fazio (DFMT).

Data: 24 de agosto de 2001.

Processo Seletivo junto ao Departamento de Física Geral (Primeira Etapa).

Banca: Mário José Oliveira (DFGE), Elcio Abdalla (DFMA), Antonio Martins Figueiredo Neto (DFEP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (DFMT), Iberê Luiz Caldas (DFAP), Alinka Lépine (DFNC) e Adalberto Fazio (DFMT).

Data: 24 de agosto de 2001.

Processo Seletivo junto ao Departamento de Física Experimental (Primeira Etapa).

Banca: Mário José Oliveira (DFGE), Elcio Abdalla (DFMA), Antonio Martins Figueiredo Neto (DFEP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (DFMT), Iberê Luiz Caldas (DFAP), Alinka Lépine (DFNC) e Adalberto Fazio (DFMT).

Data: 24 de agosto de 2001.

Processo Seletivo junto ao Departamento de Física Aplicada (Primeira Etapa).

Banca: Mário José Oliveira (DFGE), Elcio Abdalla (DFMA), Antonio Martins Figueiredo Neto (DFEP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (DFMT), Iberê Luiz Caldas (DFAP), Alinka Lépine (DFNC) e Adalberto Fazzio (DFMT).

Data: 24 de agosto de 2001.

O PROCESSO SELETIVO NÃO FOI HOMOLOGADO PELO CONSELHO TÉCNICO ADMINISTRATIVO, TENDO SIDO CANCELADO NA 342ª SESSÃO DA CONGREGAÇÃO EM 08 DE NOVEMBRO DE 2001.

André Bohomoletz Henriques

Luciana Kazumi Hanamoto (Tese de Doutorado).

Título: “Efeitos de tamanho finito e de interfaces em super-redes InP/In_{0.53}Ga_{0.47}As”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. André Bohomoletz Henriques (orientador), Alain André Quivy, Marília J. Caldas, Fernando Iikawa (UNICAMP) e Paulo Sérgio S. Guimarães (UFMG).

Data: 14 de dezembro de 2001.

Antônio Domingues dos Santos

Fernando Mário Rhen Filho (Dissertação de Mestrado).

Título: “Caracterização Magnética e Estrutural de Filmes Finos de SmCo”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Frank Patrick Missell (orientador), Antônio Domingues dos Santos e Marcelo Knobel (UNICAMP).

Data: 24 de abril de 2001.

Adriana Pedrosa Biscaia Tufaile (Tese de Doutorado).

Título: “Efeito Kerr magnetoóptico espectral e sperimagnetismo de filmes amorfos de terra rara-Co”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio D. dos Santos (orientador), Hercílio R. Rechenberg, Mário José de Oliveira, Maria José P. Santos Brasil (UNICAMP) e Waldemar Augusto de A. Macedo (CDTN)

Data: 28 de maio de 2001.

Antônio José Roque da Silva

Rogério Junqueira Prado (Tese de Doutorado).

Título: “Otimização das propriedades químicas, morfológicas e estruturais de filmes finos de a-Si_{1-x}C_x:H depositados por PECVD”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Márcia Carvalho de Abreu Fantini (orientadora), Antônio José Roque da Silva, Hélio César Nogueira Tolentino (LNLS), Íris Concepción Linares de Torriani (UNICAMP) e Sérgio Álvaro de Souza Camargo Júnior (UFRJ).

Data: 19 de outubro de 2001.

Armando Corbani Ferraz

Ademir Cavalheiro (Tese de Doutorado).

Título: “O Efeito da Fotocondutividade e a Estrutura Eletrônica de Poços Quânticos de GaAs/InGaAs/GaAs com Dopagem Planar do Tipo n na Barreira”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Euzi Conceição Fernandes da Silva (orientadora), Armando Corbani Ferraz, José Brás Barreto de Oliveira (UNESP-Bauru), Márcia Carvalho de Abreu Fantini e Peter Alexander B. Schulz (UNICAMP).

Data: 23 de novembro de 2001.

Carlos Castilla Becerra

Concurso de Livre-Docência junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica.

Inscrito: Prof. Dr. Antônio Domingues dos Santos.

Comissão julgadora: Carlos Castilla Becerra, Mário José de Oliveira, Marcelo Knobel (UNICAMP), Mário Norberto Baibich (UFRGS) e Fernando Luís de Araújo Machado (UFPE).

Período: de 05 a 06 de dezembro de 2001.

Carmen Silvia de Moya Partiti

Marcelo Takara (Dissertação de Mestrado).

Título: “Efeitos de Solvente na Absorção Ótica e Fluorescência do Ácido Aminobenzóico”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Amando Siuiti Ito (orientador - FFCLRP/USP), Carmen Silvia de Moya Partiti e Iouri Borissevitch (FFCLRP/USP).

Data: 10 de setembro de 2001.

Euzi Conceição Fernandes da Silva

Ademir Cavalheiro (Tese de Doutorado).

Título: “O Efeito da Fotocondutividade e a Estrutura Eletrônica de Poços Quânticos de GaAs/InGaAs/GaAs com Dopagem Planar do Tipo n na Barreira”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Euzi Conceição Fernandes da Silva (orientadora), Armando Corbani Ferraz, José Brás Barreto de Oliveira (UNESP-Bauru), Márcia Carvalho de Abreu Fantini e Peter Alexander B. Schulz (UNICAMP).

Data: 23 de novembro de 2001.

Frank Patrick Missell

Jeroen Schoenmaker (Dissertação de Mestrado).

Título: “Processamento e caracterização de filmes finos de ligas ternárias de CoCrTa e CoCrPt”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Ivette Frida Cymbaum Oppenheim (orientadora), Frank Patrick Missell e Carlos Alberto Achete (UFRJ).

Data: 28 de março de 2001.

Fernando Mário Rhen Filho (Dissertação de Mestrado).

Título: “Caracterização Magnética e Estrutural de Filmes Finos de SmCo”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Frank Patrick Missell (orientador), Antônio Domingues dos Santos e Marcelo Knobel (UNICAMP).

Data: 24 de abril de 2001.

Gerardo Fabián Goya

Vinícius Alegreti Meza (Dissertação de Mestrado).

Título: “Preparação e Caracterização de Compostos $\text{PrBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ ”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Renato de Figueiredo Jardim (orientador), Gerardo Fabián Goya e Iakov Veniaminovitch Kopelevitch (UNICAMP).

Data: 03 de maio de 2001.

Guennadii Michailovich Gusev

Sara Cristina Pinto Rodrigues (Tese de Doutorado).

Título: “Estrutura de bandas de heteroestruturas semicondutoras dopadas tipo-p”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Luísa Maria Ribeiro Scolfaro (orientadora), Guennadii Michailovich Gusev, Guo Qiang Hai (IFSC/USP), Antônio Ferreira da Silva (UFBA) e Ivan Costa da Cunha Lima (UERJ).

Data: 28 de maio de 2001.

Helena Maria Petrilli

Luís Alberto Terrazos Javier (Tese de Doutorado).

Título: “Propriedades Eletrônicas e Estruturais de Compostos Intermetálicos C11_b”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Helena Maria Petrilli (orientadora), Lucy Vitória Credídio Assali, Arthur Wilson Carbonari (IPEN), Diana Josefina Rosa Guenzburger (CBPF) e Henrique Saitovitch (CBPF).

Data: 18 de abril de 2001.

Hercílio Rodolfo Rechenberg

Concurso para o provimento de um cargo de Professor Titular junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica.

Inscritos: Profs. Drs. Armando Corbani Ferraz, André Bohomoletz Henriques e Renato de Figueiredo Jardim.

Comissão Examinadora: Hercílio Rodolfo Rechenberg (presidente), Luiz Guimarães Ferreira, João Alziro Herz da Jornada (UFRGS), Helion Vargas (UENF) e Luiz Nunes de Oliveira IFSC/USP).

Período: de 22 a 23 de maio de 2001.

Adriana Pedrosa Biscaia Tufaile (Tese de Doutorado).

Título: “Efeito Kerr magnetoóptico espectral e sperimagnetismo de filmes amorfos de terra rara-Co”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio D. dos Santos (orientador), Hercílio R. Rechenberg, Mário José de Oliveira, Maria José P. Santos Brasil (UNICAMP) e Waldemar Augusto de A. Macedo (CDTN)

Data: 28 de maio de 2001.

Processo Seletivo junto ao Departamento de Física Matemática (Primeira Etapa).

Banca: Mário José Oliveira (DFGE), Elcio Abdalla (DFMA), Antonio Martins Figueiredo Neto (DFEP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (DFMT), Iberê Luiz Caldas (DFAP), Alinka Lépine (DFNC) e Adalberto Fazzio (DFMT).

Data: 24 de agosto de 2001.

Processo Seletivo junto ao Departamento de Física Geral (Primeira Etapa).

Banca: Mário José Oliveira (DFGE), Elcio Abdalla (DFMA), Antonio Martins Figueiredo Neto (DFEP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (DFMT), Iberê Luiz Caldas (DFAP), Alinka Lépine (DFNC) e Adalberto Fazzio (DFMT).

Data: 24 de agosto de 2001.

Processo Seletivo junto ao Departamento de Física Experimental (Primeira Etapa).

Banca: Mário José Oliveira (DFGE), Elcio Abdalla (DFMA), Antonio Martins Figueiredo Neto (DFEP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (DFMT), Iberê Luiz Caldas (DFAP), Alinka Lépine (DFNC) e Adalberto Fazzio (DFMT).

Data: 24 de agosto de 2001.

Processo Seletivo junto ao Departamento de Física Aplicada (Primeira Etapa).

Banca: Mário José Oliveira (DFGE), Elcio Abdalla (DFMA), Antonio Martins Figueiredo Neto (DFEP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (DFMT), Iberê Luiz Caldas (DFAP), Alinka Lépine (DFNC) e Adalberto Fazzio (DFMT).

Data: 24 de agosto de 2001.

O PROCESSO SELETIVO NÃO FOI HOMOLOGADO PELO CONSELHO TÉCNICO ADMINISTRATIVO, TENDO SIDO CANCELADO NA 342ª SESSÃO DA CONGREGAÇÃO EM 08 DE NOVEMBRO DE 2001.

José Roberto Leite

Concurso de Livre-Docência junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica.

Inscrito: Prof. Dr. Guennadii Michailovich Gusev.

Comissão julgadora: José Roberto Leite, Antônio Martins Figueiredo Neto, Nelson Studart Filho (UFSCar), Eliermes Arraes Menezes (UNICAMP) e Israel Jacob Rabin Baumvol (UFRGS).

Período: de 29 a 31 de janeiro de 2001.

Lucy Vitória Credidio Assali

Marcelo Marques (Dissertação de Mestrado).

Título: “Propriedades Eletrônicas das Ligas $Al_xGa_{1-x}N$ e $In_xGa_{1-x}N$ e da Impureza aceitadora de Carbono”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Luísa Maria Ribeiro Scolfaro (orientadora), Lucy Vitória Credidio Assali e Américo Sheitiro Tabata (UNESP/Bauru).

Data: 22 de fevereiro de 2001.

Luís Alberto Terrazos Javier (Tese de Doutorado).

Título: “Propriedades Eletrônicas e Estruturais de Compostos Intermetálicos $C11_b$ ”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Helena Maria Petrilli (orientadora), Lucy Vitória Credidio Assali, Arthur Wilson Carbonari (IPEN), Diana Josefina Rosa Guenzburger (CBPF) e Henrique Saitovitch (CBPF).

Data: 18 de abril de 2001.

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Marcelo Marques (Dissertação de Mestrado).

Título: “Propriedades Eletrônicas das Ligas $Al_xGa_{1-x}N$ e $In_xGa_{1-x}N$ e da Impureza aceitadora de Carbono”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Luísa Maria Ribeiro Scolfaro (orientadora), Lucy Vitória Credidio Assali e Américo Sheitiro Tabata (UNESP/Bauru).

Data: 22 de fevereiro de 2001.

Lara Kühn Teles (Tese de Doutorado).

Título: “Propriedades estruturais eletrônicas e termodinâmicas dos nitretos do grupo-III e de suas ligas”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Luísa Maria R. Scolfaro (orientadora), Adalberto Fazzio, Mário José de Oliveira, Carlos Lenz César (UNICAMP) e José Luiz A. Alves (FUNREI).

Data: 10 de maio de 2001.

Sara Cristina Pinto Rodrigues (Tese de Doutorado).

Título: “Estrutura de bandas de heteroestruturas semicondutoras dopadas tipo-p”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Luísa Maria Ribeiro Scolfaro (orientadora), Guennadii Michailovich Gusev, Guo Qiang Hai (IFSC/USP), Antônio Ferreira da Silva (UFBA) e Ivan Costa da Cunha Lima (UERJ).

Data: 28 de maio de 2001.

Renato de Figueiredo Jardim

Vinícius Alegreti Meza (Dissertação de Mestrado).

Título: “Preparação e Caracterização de Compostos $\text{PrBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ ”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Renato de Figueiredo Jardim (orientador), Gerardo Fabián Goya e Iakov Veniaminovitch Kopelevitch (UNICAMP).

Data: 03 de maio de 2001.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Valdemir Eneias Ludwig (Dissertação de Mestrado).

Título “Estudo Teórico das Propriedades Espectroscópicas do Complexo Guanina-Citosina”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Sylvio Roberto Accioly Canuto (orientador), Antonio Carlos Borin (IQ/USP) e Willian Ricardo Rocha (UFJF).

Data: 06 de abril 2001.

Marcos Serrou do Amaral (Tese de Doutorado).

Título: “Estudo teórico dos espectros de absorção e fluorescência do triptofano e análogos”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Michel Loos (presidente), Marília Junqueira Caldas, Sylvio Roberto Accioly Canuto, Paulo Monteiro Vieira Braga Barone (UFJF) e Pedro Geraldo Pascutti (UFRJ).

Data: 05 de dezembro de 2001.

Concurso de Livre-Docência junto ao Departamento de Física Geral.

Inscrita: Profa. Dra. Vera Bohomoletz Henriques.

Comissão julgadora: Mário José de Oliveira, Sylvio Roberto Accoly Canuto, Amando Siuiti Ito (FFCLRP/USP), Roberto Nicolau Onody (IFSC-USP) e Ronald Dickman (UFMG).

Período: de 13 a 15 de agosto de 2001.

Concurso de Livre-Docência junto ao Departamento de Física Aplicada.

Inscrita: Profa. Dra. Rosângela Itri.

Comissão julgadora: Aldo Felix Craievich, Sylvio Roberto Accoly Canuto, Amando Siuiti Ito (FFCLRP/USP), Yvonne Primerano Mascarenhas (IFSC-USP) e Ana Maria Carmona Ribeiro (IQ/USP).

Período: de 24 a 26 de setembro de 2001.

Valdir Bindilatti

Henady Malarenko Júnior (Dissertação de Mestrado).

Título: “Interações de troca em $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ ”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Valdir Bindilatti (orientador), Carlos Seihti Orii Yokoi, e Miguel Alexandre Novak (UFRJ).

Data: 01 de junho de 2001.

Nelson Alves Júnior (Tese de Doutorado).

Título: “Efeitos da Desordem do Campo Cristalino sobre as Fases Moduladas de um Modelo Magnético”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Carlos Seihti Orii Yokoi (orientador), Sílvio Roberto de Azevedo Salinas, Valdir Bindilatti, Evaldo Mendonça Fleury Curado e Sérgio Galvão Coutinho.

Data: 23 de agosto de 2001.

Jose Rafael León Fernandez (Tese de Doutorado).

Título: “Propriedades elétricas e vibracionais de nitretos cúbicos do grupo III”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Valmir Antônio Chitta (orientador - USF), Marco Henrique Degani (USF), Valdir Bindilatti, Inês P. de Alvarez (EPUSP) e José Cláudio Galzerani (UFSCar).

Data: 10 de dezembro de 2001.

3f - Participação em Comissões Julgadoras em Outras Instituições:

Adalberto Fazzio

David Lima Azevedo (Tese de Doutorado).

Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

Data: 21 de fevereiro de 2001.

Françoise Toledo Reis (Tese de Doutorado).

Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

Data: 13 de março de 2001.

Concurso para Provimento de um Cargo de Professor Titular.

Departamento de Engenharia de Sistemas Eletrônicos, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, SP.

Período: de 27 a 29 de agosto de 2001.

Paulo Sérgio Branício (Tese de Doutorado).

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia, Universidade Federal de São Carlos.

Data: 31 de agosto de 2001.

Prof. Dr. Iouri Poussep (Concurso de Livre-Docência).

Instituto de Física da Universidade de São Paulo, São Carlos, SP.

Período: de 22 a 23 de novembro de 2001.

Antônio José Roque da Silva

Frederico Guilherme de Carvalho Cunha (Tese de Doutorado).

Instituto de Química da Universidade de São Paulo, São Carlos, SP.

Data: 18 de junho de 2001.

Daniel Tygel (Dissertação de Mestrado).

Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

Data: 03 de agosto de 2001.

Luiz Ferreira Portella Filho (Dissertação de Mestrado).

Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS.

Data: 24 de setembro de 2001.

Hercílio Rodolfo Rechenberg

Jorge Higino Dias Filho (Tese de Doutorado).

Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG.

Data: 23 de junho de 2001.

Hidetoshi Takiishi (Tese de Doutorado).

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN, São Paulo, SP.

Data: 30 de novembro de 2001.

José Roberto Leite

Clóves Gonçalves Rodrigues (Tese de Doutorado).

Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

Data: 16 de janeiro de 2001.

Adenilson José Chiquito (Tese de Doutorado).

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia de Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP.

Data: 20 de fevereiro de 2001.

Victor López Richard (Tese de Doutorado).

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia de Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP.

Data: 07 de março de 2001.

Izilda Marcia Ranieri (Tese de Doutorado).

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN, São Paulo, SP.

Data: 19 de abril de 2001.

Concurso de Livre-Docência.

Departamento de Engenharia Elétrica, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, SP.

Data: 19 de junho de 2001.

Luiz Vicente Gomes Tarelho (Tese de Doutorado).

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN), São Paulo, SP

Data: 14 de agosto de 2001.

Concurso de Livre-Docência.

Universidade Federal de São Carlos, UFSCar, São Carlos, SP.

Período: de 17 a 18 de setembro de 2001.

Concurso Público de Provas e Títulos para Professor Adjunto, Nível 1.

Universidade Federal de São Carlos, UFSCar, São Carlos, SP.

Período: de 04 a 06 de dezembro de 2001.

Marco Teixeira do Nascimento Varella (Tese de Doutorado).

Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

Data: 19 de dezembro 2001.

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

José Augusto Pedro Lima (Tese de Doutorado).

Universidade Estadual do Norte Fluminense, Campos de Goytacazes, RJ.

Período do afastamento: de 16 a 17 de agosto de 2001.

Renato de Figueiredo Jardim

Janaina Galho Borges (Dissertação de Mestrado).

Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, RS.

Período do afastamento: de 20 a 22 de março de 2001.

Millon Morais Xavier Junior (Tese de Doutorado).
Universidade Federal do Rio Grande Norte, Natal, RN.
Período do afastamento: de 28 a 30 de março de 2001.

Marcos de Abreu Ávila (Tese de Doutorado).
Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.
Data: 04 de julho de 2001.

Henrique Peter Rivas Padilla (Tese de Doutorado).
Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.
Data: 10 de julho 2001.

Penélope Martinho Lima Pontes (Tese de Doutorado).
Instituto de Química da Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP.
Data: 17 de agosto de 2001.

Ivair A. dos Santos (Tese de Doutorado).
Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP.
Data: 13 de setembro de 2001.

Sônia Frota-Pessôa

Javier Antonio Gomez Romero (Tese de Doutorado).
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, RJ.
Período: setembro de 2001.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

David Lima Azevedo (Tese de Doutorado).
Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.
Data: 21 de fevereiro de 2001.

Cristiano Ruch Werneck Guimarães (Tese de Doutorado).
Instituto de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ.
Data: 17 de agosto de 2001.

Marcelo Zaldini Hernandez (Tese de Doutorado).
Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Universidade Federal Pernambuco, Recife, PE.
Data: 22 de agosto de 2001.

José André Teixeira Azevedo (Tese de Doutorado).
Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ.
Período do afastamento: de 25 a 28 de outubro de 2001.

Concurso de Livre-Docência.
Prof. Dr. Antonio Carlos Borin.
Instituto de Química da Universidade de São Paulo, São Paulo, SP.
Data: 07 de novembro de 2001.

Ana Elizabete de Araújo Machado (Tese de Doutorado).
Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE.
Período do afastamento: de 22 a 24 de novembro de 2001.

Ana Márcia Alves Taveira (Tese de Doutorado).
Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.
Data: 14 de dezembro de 2001.

3g - Participação em Conselhos, Comissões e Grupos de Trabalho de Entidades Oficiais ou Privadas:

Adalberto Fazio

Membro da Academia Brasileira de Ciências.

Membro do Comitê de Avaliação para Concessão do Prêmio Zeferino Vaz de Física da UNICAMP (2001).

Membro do Comitê Multidisciplinar de Articulação do CNPq (mandato: de 2000 a 2001).

Membro do Comitê Organizador da “School on Computational Physics”, Centro Internacional de Física da Matéria Condensada, Universidade de Brasília, Brasília, DF (período: de 20 a 24 de agosto de 2001).

Membro Eleito do Conselho da Sociedade Brasileira de Física (mandato: de 2001 a 2005).

Membro Titular da Academia de Ciências do Estado de São Paulo.

Membro Titular da Academia Brasileira de Ciências.

Presidente do Comitê Assessor de Física/Astronomia do CNPq (mandato: de 1999 a 2001).

Vice-Presidente da Sociedade Brasileira de Física (mandato: de julho de 1999 a julho de 2001).

Antônio Domingues dos Santos

Membro da Comissão Organizadora do Curso de Verão - IFUSP'2001, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (período: de 27 de janeiro a 09 de fevereiro de 2001).

Membro do Comitê Nacional da IIIa. Escola Brasileira de Magnetismo, Porto Alegre-RS (período: de 17 a 25 de outubro de 2001).

Antônio José Roque da Silva

Membro do Comitê Organizador do Curso de Verão - IFUSP'2001, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (período: de 29 de janeiro a 09 de fevereiro de 2001).

Frank Patrick Missell

Coordenação da Área de Física - FAPESP.

Membro da American Physical Society.

Membro do Corpo Editorial - Brazilian Journal of Physics.

Presidente do Comitê de Gestão do Laboratório de Análise de Materiais por Feixe Iônico (LAMFI).

Helena Maria Petrilli

Membro do Comitê Internacional da “12th International Conference on Hyperfine Interactions”, realizada em Park City, Utah, EUA (período: agosto de 2001).

Membro do Comitê Internacional de Interações Quadrupolares (a partir julho de 1999).

Hercílio Rodolfo Rechenberg

Membro do International Board on the Applications of the Mössbauer Effect (IBAME).

José Roberto Leite

Membro do Editorial Board da revista *Modern Physics Letters B* publicada pela World Scientific, Singapore.

Membro do Editorial Board da revista *International Journal of Modern Physics B* publicada pela World Scientific, Singapore.

Membro do Editorial Board da revista *Microelectronics Journal* publicada pela Elsevier Science, England.

Membro do Editorial Board da revista *Physica Status Solidi (b)*, Wiley-VCH Verlag, Berlin, Germany.

Membro do Comitê de Avaliação das Propostas de Pesquisa do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS, Campinas, SP.

Membro do Comitê Organizador da “International Specialist Meeting on Bulk Nitride Growth and Related Techniques” (Bulk Nitride 2002), Manaus, AM.

Membro do Comitê de Avaliação do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica PIBIC, UnB, Brasília, DF.

Organizador da “International Iberoamerican School on Epitaxial Growth of Semiconductor Nanostructures” (EICENS'1), Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (período: de 19 a 23 de novembro de 2001).

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Membro do Comitê Organizador Local da “International Iberoamerican School on Epitaxial Growth of Semiconductor Nanostructures” (EICENS'1), Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (período: de 19 a 23 de novembro de 2001).

Membro do Comitê Organizador Local do “XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada”, Caxambu, MG (período: de 15 a 19 de maio de 2001).

Renato de Figueiredo Jardim

Membro do Comitê Organizador da “V Escola Brasileira de Supercondutividade”, Recife, PE (período: dezembro de 2001).

Membro do Conselho Editorial da Revista de Circulação Internacional *Materials Research* (período: de 1999 a 2001).

Membro Fundador da Sociedade Brasileira de Pesquisa em Materiais - SBPMat. (período: 2001)

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Editor Associado do *Brazilian Journal of Physics*.

Editor Especialista da *Computer Physics Communications*.

Editor Especialista da *International Journal of Quantum Chemistry*.

Membro da Comissão de Avaliação da Pós-Graduação da CAPES.

Membro Titular do Conselho da Sociedade Brasileira de Física.

Presidente do Comitê Assessor de Física/Astronomia do CNPq (mandato: de setembro de 2001 a novembro de 2002).

4 - ATIVIDADES DE PESQUISA

4a - Grupos de Pesquisa:

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Docentes:

Adalberto Fazzio

Antônio José Roque da Silva

Armando Corbani Ferraz

Helena Maria Petrilli

Kazunori Watari

Lucy Vitória Credidio Assali

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Pós-Doutores:

Cesar Renato Simenes da Silva (FAPESP)

Pedro Paulo de Mello Venezuela (FAPESP)

Puspitapallab Chaudhuri (FAPESP)

Ronei Miotto (FAPESP)

Walter Manuel Orellana Muñoz (FAPESP)

Doutorandos:

Eduardo Augusto Rissi (FAPESP)

Eudes Eterno Fileti (FAPESP)

Fábio Bretas de Freitas

Frederico Ayres de Oliveira Neto (FAPESP)

Frederico Dutilh Novaes (CNPq)

Gustavo Martini Dalpian (FAPESP)
Karina de Oliveira Barbosa (CNPq)
Marcilei Aparecida Guazzelli da Silveira (FAPESP)
Pablo Guillermo Gonzales Ormeño (CNPq)
Roberto Rivelino de Melo Moreno (CNPq)
Valdemir Eneias Ludwig (FAPESP)

Mestrados:

Andrei Reyes Huamantincó (FAPESP)
Daniel Rodrigo Ferreira Trzesniak (FAPESP)
Fábio Campos Poderoso (CNPq)
Herbert de Castro Georg (FAPESP)
Ivam Pereira Mendes Neto (FAPESP)
José Carrijo de Faria Jr. (FAPESP)
Renato Borges Pontes (CNPq)
Rolando Larico Mamani (CNPq)
Sandro Pereira Vilela (CNPq)
Thaciana Valentina Malaspina Fileti (FAPESP)

Iniciação Científica:

Alexandre Martins Melo (CNPq)
Edwin Hobi Júnior (CNPq)
Ferenc Diniz Kiss (CNPq)

Colaboradoras Permanentes:

Kaline Rabelo Coutinho
Sonia Frota-Pessôa
Wanda Valle Marcondes Machado

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:

Alex Antonelli (Universidade Estadual de Campinas, SP) - visitas curtas.
Ângela Burlamaqui Klautau (Universidade Federal do Pará, Pa, Belém) - visitas curtas.
Douglas Soares Galvão (Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP) - visitas curtas.
Edison Zacarias da Silva (Universidade Estadual de Campinas, SP) - visitas curtas.
Eduardo Kojy Takahashi (Universidade Federal de Uberlândia). Período: de 01.09.2001 a 31.01.2002.
Florian Müller-Plathe (Max-Planck Institut für Polymerforschung, Mainz, Alemanha). Período: de 13 a 22.02.2001 e de 27.02 a 10.03.2001.
Geerd H.F. Diercksen (Max-Planck Institut für Astrophysik, Garching, Alemanha). Período: de 29.10 a 18.11.2001 e de 24 a 30.11.2001.
Hans Ågren (Royal Institute of Technology, Estocolmo, Suécia). Período: de 02 a 22.11.2001.
Olle Eriksson (Uppsala University, Uppsala, Suécia). Período: de 20.10 a 03.11.2001.
Paulo Cesar Piquini (Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, RS) - visitas curtas.
Roberto Hiroki Miwa (Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG) - visitas curtas.
Rogério J. Baierle (Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, RS) - visitas curtas.

Ronaldo Mota (Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, RS) - visitas curtas.

Sérgio Benites Legoas (Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP) - visitas curtas.

Tomé Mauro Schmidt (Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG) - visitas curtas.

Willian Ricardo Rocha (Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, MG) - visitas curtas.

Pessoal Administrativo:

Marisa Fernandes da Silva

Grupo de Transição de Fase e Supercondutividade

Docentes:

Armando Paduan Filho

Carlos Castilla Becerra

Carlos Henrique Westphal

Renato de Figueiredo Jardim

Pós-Doutores:

Fábio Coral Fonseca (FAPESP)

Doutorandos:

Alessandro de Souza Carneiro (FAPESP)

Márcia Tsuyama Escote (FAPESP)

Zulmara Virgínia de Carvalho (CNPq)

Vinicius Meza (FAPESP)

Mestrandos:

José Antônio Souza (FAPESP)

Iniciação Científica:

Solange de Andrade (FAPESP)

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:

Prof. Alex H. Lacerda (Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, USA). Período: de 01 a 15.05.2001.

Prof. Milton Torikachvili (San Diego, State University, San Diego CA, USA). Período: de 01 a 30.08.2001.

Prof. Pedro Demetrio Muñe Bandera (Universidade de Oriente, Santiago de Cuba, Cuba). Período: de 01.10 a 30.11.2001.

Pessoal Técnico:

Carlos Alberto Barioni

Eronides Alves de Almeida

Fábio Henrique Grossi

Flavio do Carmo Fontenelle

José Alexandre dos Santos

José Teodosio da Silva
Olimpio Ribeiro da Fonseca Neto
Rui Fernandes de Oliveira
Vagner Braghin
Walter Soares de Lima

Pessoal Administrativo:

Cecília Aparecida Cavalheiro Maia

Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas (LESBT)

Docentes:

André Bohomoletz Henriques
Ewout Ter Haar
Nei Fernandes de Oliveira Júnior
Valdir Bindilatti

Pós Doutorandos:

Ramon V. Martin (CNPq)
José A. Huamani Coaquira (FAPESP)
Xavier Gratens (FAPESP)

Doutorandos:

John Carlos M. Uchoa (CNPq)
Luciana K. Hianamoto (CAPES)
Ricardo Faveron de Oliveira (CAPES)

Mestrandos:

Henady Malarenko Jr. (FAPESP)
Rafael Alejandro Cajacuri Merino (sem bolsa)

Iniciação Científica:

Marcelo Scolaro Morlotti (CNPq)

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:

Prof. Alexandre Ricalde Rodrigues (Univ. Federal de Pernambuco) Período: de 07 a 09.03.2001 e de 23 a 28.09.2001.

Prof. Yaacov Shapira (Tufts University, EUA). Período: de 11 a 24.03.2001.

Prof. Jesus Javier Campo Ruiz (Instituto Lane, Langevin, Franca). Período: de 25 a 31.03.2001.

Prof. Kevin Bedell (Boston College, MA, USA). Período: de 04 a 05.06.2001.

Prof. Barry C. Barish (Diretor of the LIGO Project, Califórnia Institute of Technology).
Data: 25.10.2001.

Pessoal Técnico:

Carlos Alberto Barioni
Eronides Alves de Almeida
Fábio Henrique Grossi
Flavio do Carmo Fontenelle
José Alexandre dos Santos

José Teodosio da Silva
Olimpio Ribeiro da Fonseca Neto
Rui Fernandes de Oliveira
Vagner Braghin
Walter Soares de Lima

Pessoal Administrativo:

Cecília Aparecida Cavalheiro Maia

Laboratório de Materiais Magnéticos (LMM)

Docentes:

Antônio Domingues dos Santos
Carmen Silvia de Moya Partiti
Frank Patrick Missell
Gerardo Fabián Goya
Hercílio Rodolfo Rechenberg
Valquíria Villas Boas Gomes Missell

Pós-Doutores:

José Antonio Coaquira (FAPESP)
Thelma de Souza Berquó (FAPESP)

Doutorandos:

Adriana P. B. Tufaile (FAPESP)
Angela Dayana Barra Barrera (FAPESP)
Denis Rezende de Jesus (CNPq)
Regina K. Murakami (FAPESP)
Shintaro Jonen (FAPESP)
Alessandro Martins (FAPESP)

Mestrandos:

Daniel R. Franco (CNPq)

Iniciação Científica:

Fabio O. Jorge (IFUSP)
Leonardo N. Nóbrega (PIBIC/CNPq)
Ivanine Estrella Fachini Vieira (PIBIC/CNPq)

Colaboradora Permanente:

Dra. Rosely A.L. Imbernon, Universidade de Mogi das Cruzes (UMC)

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:

Dr. Daniel Reinaldo Cornejo (FAMAF, Argentina). Período: de 5 a 10.11.2001.
Dr. Javier Campo (Institut Laue-Langevin, Grenoble, França): Período: de 11 a 18.03.2001.
Dr. Leandro Socolovsky (Universidade de La Plata, Argentina). Período: de 19.01 a 10.02.2001.

Pessoal Técnico:

Marcelo Shiroma Lancarotte
Marco Antonio Meira

Paulo Sergio Martins da Silva
Renato Cohen
Sérgio Antonio Romero

Pessoal Administrativo:

Iran Mamedes de Amorim

Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS-MBE)

Docentes:

Euzi Conceição Fernandes da Silva
Guennadii Michailovitch Gusev
José Roberto Leite
Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Pós-Doutores:

Lara Kühl Teles (FAPESP)
Marcionílio Teles de Oliveira Silva (FAPESP)
Virgílio de Carvalho dos Anjos (FAPESP)

Doutorandos:

Ademir Cavalheiro
Adriano Manoel dos Santos
Cássio Sanguini Sérgio
David Gregório Pacheco Salazar
José Rafael León Fernández
Lara Kühl Teles
Luis Eugenio Ramos
Marcelo Jacob da Silva
Marcelo Marques
Marcos Frizzarini
Nilo Maurício Sotomayor Choque
Odille Cue Noriega
Ricardo Trentin
Sandro Martini
Sara Cristina Pinto Rodrigues
Tomas Erikson Lamas

Mestrandos:

Angela Maria Ortiz de Zevallos Marquez
Celso de Araújo Duarte
Marcelo Marques
Sérgio Takimoto Mauricio

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:

Prof. Aleksei Bykov (Institute of Semiconductor Physics, Russian Academy, Siberian Branch) Novosibirsk, Rússia. Período: de 08.05 a 08.08.2001.

Prof. Américo Sheitiro Tabata (UNESP-Bauru, Departamento de Física, Bauru, SP). Diversas visitas curtas semanais durante todo o ano de 2001.

Prof. Antonio Ferreira da Silva (Universidade Federal da Bahia - UFBA, Instituto de Física, Salvador, BA). Período: de 27 a 29.07.2001.

Prof. Donat As (Universidade de Paderborn, Departamento de Física, Paderborn, Alemanha). Período: de 28.08 a 15.09.2001.

Prof. Edilson Sérgio Silveira (Universidade Federal do Paraná, Departamento de Física, Curitiba, PR). Períodos: de 08 a 19.01.2001 e de 29.01 a 09.02.2001.

Prof. Eliermes Arraes Meneses (Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP). Períodos: (a) em 18.01.2001; (b) de 08 e 22.02.2001; (c) dias 08, 20 e 27.03.2001; (d) 10.04.2001; (e) 22.05.2001; (f) dias 05, 19 e 20.06.2001; (g) 02.07.2001; (h) dias 2, 9, 21 e 30.08.2001; (i) 11.09.2001; (j) dias 4 e 23.10.2001; (l) dias 23 e 29.11.2001.

Prof. Eronides Felisberto da Silva Júnior (Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE). Período: de 20 a 22.11.2001.

Prof. Euclides Marega Júnior (Universidade Federal de São Carlos, Instituto de Física, São Carlos, SP). Período: de 19 a 23.11.2001.

Dr. Evaldo Ribeiro (Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP). Datas: (a) 18.01.2001; (b) 20.03.2001; (c) 10.04.2001; (d) 19.06.2001.

Prof. Gil Aquino (Universidade Federal do Ceará, Departamento de Física, Fortaleza, CE). Período: de 20 a 22.11.2001.

Prof. Guilherme Matos Sipahi (Instituto de Física de São Carlos, USP, São Carlos, SP). Dias: (a) 20 e 27.04.2001; (b) 4, 11, 18 e 25.05.2001; (c) 1, 8, 27 e 28.06.2001; (d) 18.12.2001.

Prof. Helmut Sitter (Johannes Kepler Universität, Institut für Experimental Physik, Alemanha). Período: de 18 a 20.11.2001.

Prof. Horácio Wagner Leite Alves (FUNREI, São João del Rei, MG). Período: de 23.07 a 03.08.2001.

Prof. Isaac Hernández Calderón (Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN - CINVESTAV, Departamento de Física, México D.F., México). Período: de 19 a 24.11.2001.

Prof. Ivan Costa da Cunha Lima (Universidade Estadual do Rio de Janeiro - UERJ, Instituto de Física, Rio de Janeiro, RJ). Períodos: de 27 a 29.07.2001 e de 17 a 18.12.2001.

Dr. Jaime A. Freitas Jr. (ESTD - Electronic Materials Branch, do Naval Research Laboratory, em Washington D.C., EUA). Períodos: de 14 a 26.05.2001 e de 11 a 23.11.2001.

Prof. Jean Claude Portal (CNRS-LCMI, França). Períodos: 05 a 13.06.2001 e de 27.10 a 05.11.2001.

Prof. Joaquin Tutor Sanchez (Universidade de La Habana, Instituto de Materiales y Reactivos (IMRE), Havana, Cuba). Período: de 03.02 a 12.03.2001.

Prof. Klaus Lischka (Universidade Paderborn, Departamento de Física, Paderborn, Alemanha). Período: de 19 a 24.11.2001.

Profª. Luísa González (Instituto de Microelectrónica de Madrid, Madrid, Espanha). Período: de 18 a 23.11.2001.

Prof. Marco Aurélio Boselli (Universidade Estadual do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ). Data: 17.12.2001.

Profa. Maria de Jesus Matos Gomes (Universidade do Minho, Departamento de Física, Braga, Portugal). Período: de 18 a 24.11.2001.

Prof. Martin Stutzmann (Walter Schottky, Technische Universität Muenchen, Garching, Alemanha). Período: de 23 a 27.04.2001.

Prof. Mohamed Henini (Universidade de Nottingham, School of Physics and Astronomy, Nottingham, Inglaterra). Período: de 17 a 22.11.2001.

Profa. Patrícia Lustoza (Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Depto. de Física, Rio de Janeiro, RJ). Período: de 19 a 22.11.2001.

Prof. Thomas H. Myers (Universidade de West Virginia, Departamento de Física, EUA). Período: de 17 a 24.11.2001.

Prof. Valder Nogueira Freire (Universidade Federal do Ceará - UFC, Departamento de Física, Fortaleza, CE). Períodos: (a) em 30.01.2001; (b) de 11 a 14.09.2001; (c) de 10 a 11.12.2001.

Prof. Victor Ramon Velasco (Universidade da Espanha, Madri, Espanha). Período: de 11 a 24.03.2001.

Dr. Virgílio C. Anjos (Universidade de Hamburgo, Alemanha). Data: 30.05.2001.

Prof. Wagner Nunes Rodrigues (Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física, Belo Horizonte, MG). Período: de 19 a 21.11.2001.

Pessoal Técnico:

Márcia Ribeiro

José Geraldo Chagas

Pessoal Administrativo:

Enza Enrica Matteis (até agosto de 2001)

Érica Satake Noda (a partir de setembro de 2001)

4b - Trabalhos em Andamento ou Concluídos em 2001:

Grupo Teórico de Materiais

Coordenadores: Adalberto Fazzio e Sylvio Canuto

“Propriedades Estruturais e Eletrônicas de Materiais Ordenados e Desordenados”

Fazzio, A.

A área de pesquisa na qual nosso grupo vem trabalhando podemos definir numa forma mais ampla como sendo a de simulação e modelagem computacional. Nosso interesse nessa área está no estudo das propriedades eletrônicas, estruturais e óticas de materiais. Nosso grupo tem um grande conhecimento acumulado na área, tendo desenvolvido métodos, técnicas, algoritmos para o estudo de átomos, moléculas e sólidos. Nossos objetivos de pesquisa são bastante plurais, no sentido em que não estamos nos fixando em um determinado material ou em um determinado processo físico.

Atualmente nosso objetivo está voltado para o estudo de sistemas desordenados sujeito a parâmetros externos como temperatura, pressão, dopagens etc. Destacamos:

i) Estudo das propriedades eletrônicas e estruturais de semicondutores "canônicos" como Si e Ge na fase amorfa, num regime intrínseco e num regime extrínseco tipo-n e tipo-p. Esse estudo é feito via potenciais empíricos ou métodos de primeiros princípios à temperaturas finitas. Esse trabalho vem sendo desenvolvido em colaboração com o bolsista de pós-doutoramento Dr. João Justo e Prof. Alex Antonelli da UNICAMP.

ii) Análise no processo de crescimento de materiais e adsorção de átomos em superfícies. Procurando entender a física de superfícies de materiais tipo IV, particularmente o diamante estamos desenvolvendo algoritmos baseado num Monte Carlo Cinético. Essa linha de pesquisa é bastante ampla que envolve além do processo de crescimento, um estudo detalhado no estudo de adsorção de átomos. Trabalho em colaboração com o Prof. Antônio José Roque da Silva.

iii) Semicondutores III-V sujeito a processos de irradiação de íons é outra linha de pesquisa que temos desenvolvido. Aqui o objetivo é o estudo da formação de defeitos simples e complexos quando o material é sujeito a uma implantação iônica. Neste trabalho a simulação teórica procura "imitar" a experiência desde a implantação, formação de defeitos, processos de recozimentos térmicos, estrutura eletrônica etc. Esse trabalho vem sendo realizado em colaboração com o Prof. R. Mota da UFSM e meu aluno de doutoramento Anderson Janotti.

iv) Atualmente estamos desenvolvendo potenciais empíricos para o estudo de métodos de silício e carbono. A razão desta é fazer um estudo sistemático de materiais Si_3N_4 na fase amorfa e suas diferentes estequiometrias SiN_x . Já temos alguns resultados bastante promissores que nos possibilitarão fazer um estudo detalhado das propriedades estruturais e mecânicas do material. O estudo é feito no primeiro estágio via Monte Carlo com o potencial empírico desenvolvido em seguida utilizaremos um método quântico de dinâmica molecular de Car-Parrinello.

v) Utilizando métodos ab initio para uma dinâmica molecular com a célula variável, estamos estudando $\text{Al}_2\text{O}_3:\text{Cr}^{3+}$ sujeito a altíssimas pressões. O objetivo desse trabalho é entender os processos óticos envolvidos no Rubi, quando apresenta-se em diferentes fases estruturais à diferentes pressões. Este trabalho é parte da tese de doutoramento do Sr. G. Paiva (FAPESP) e vem sendo desenvolvido em colaboração com a pesquisadora Dra. Wentzcovitch do Departamento de Física dos Materiais da Universidade de Minnesota, EUA.

“Estrutura Eletrônica de Átomos, Moléculas e Clusters. Sistemas Isolados e em Fase Líquida”

Canuto, S.

Nosso principal interesse está no estudo de propriedades, estruturas e espectros de sistemas moleculares. Para moléculas isoladas teorias de muitos corpos são utilizadas para se estudar a estrutura eletrônica do estado fundamental e estados excitados de interesse. Para poucas moléculas em interação o objeto central é entender as forças intermoleculares envolvidas e a atenção é dada a sistemas interagindo através de forças de van der Waals e ligações de hidrogênio.

Nosso maior interesse está no estudo de sistemas moleculares em fase líquida. Neste domínio nossos estudos tem centrado em efeitos de solvente em espectroscopia molecular, efeito hidrofóbico, mudanças estruturais induzidas por interação com o meio, ligações de hidrogênio, propriedades ópticas não lineares, sistemas biológicos, etc.

O estudo de sistemas líquidos requer considerações especiais para lidar com efeitos de temperatura e com a desordem natural do sistema. Nosso enfoque utiliza técnicas de simulação de Monte Carlo e Dinâmica Molecular junto com métodos de mecânica quântica.

Desta forma temos progredido no estudo da estrutura eletrônica de líquidos moleculares, onde propriedades e espectros moleculares são obtidos quânticamente. Recentemente iniciamos o estudo quântico de sistemas biológicos considerando interações com o meio solvente (água) e estamos desenvolvendo métodos, técnicas e algoritmos para se estudar moléculas interagindo com um meio solvente considerando efeitos de curto e de longo alcance.

“Propriedades eletrônicas e estruturais relacionadas a superfícies, interfaces e impurezas simples e complexas em semicondutores”.

Ferraz, A.C.

As superfícies e interfaces semicondutoras reconstróem-se diferentemente sob várias condições tais como crescimento epitaxial, temperatura, devido a deposição de camadas de passivadores ou surfactantes, ou ainda induzidas por defeitos de formação. O mecanismo principal é regido pelas ligações atômicas, entretanto, devido ao alto grau de complexidade dos processos e sistemas, tem-se a necessidade de um estudo rigoroso através de cálculos de primeiros princípios, a fim de se esclarecer tais mecanismos de formação atômica ou molecular. Desta forma, estudamos teoricamente, através da teoria do funcional da densidade e do método de dinâmica molecular quântica, as bases energéticas e físico-químicas relacionadas a adsorções atômicas e moleculares em superfícies e interfaces semicondutoras. Em particular podemos destacar alguns trabalhos específicos:

a) A interação da superfície de Si com certas moléculas reagentes é de considerável interesse devido à sua ação no processamento de dispositivos. Neste caso estudamos a interação de NH_3 , PH_3 e AsH_3 com Si (001) e Ge (001), onde a adsorção é dissociativa, e a adsorção das moléculas de Cl_2 e HCl sobre Si (001) e Si (111), onde a reconstrução da superfície é levantada e os estados são completamente passivados. Estes projetos têm a colaboração do Prof. G.P. Srivastava, da Universidade de Exeter, U.K., com o qual tenho colaboração permanente, e dos Drs. Ronei Miotto e R.H. Miwa.

b) A ação surfactante de elementos do grupo IV no crescimento epitaxial composto de semicondutores III-V / III-V é outro grande projeto, no qual esteve envolvido o Prof. Roberto H. Miwa (Universidade Federal de Uberlândia, MG). Neste particular estudamos a ação dos elementos S, Se e Te nas superfícies de GaAs, InAs e InP, bem como sua estabilização na interface GaAs/InAs que mantém o crescimento 2D dos materiais semicondutores. Considerando grandes reconstruções (4×4 , 4×2 e 2×2) podemos analisar ainda, os efeitos do recobrimento em função da concentração dos átomos do grupo IV bem como sua possível interdifusão nas interfaces.

c) Finalmente podemos destacar o estudo das propriedades dos sólidos durante o crescimento, considerando as correções no modelo LDA decorrentes da aproximação de gradiente generalizado (GGA) na energia de troca e correlação na teoria do funcional da densidade. Nesse particular, consideramos um teste completo da influência GGA no crescimento de GaN sobre GaAs bem como os efeitos decorrentes nas superfícies (001) e (110) de GaN e BN. Este projeto é desenvolvido com a colaboração do Dr. Ronei Miotto.

“Propriedades Magnéticas e Hiperfinas de Sistemas Metálicos Complexos”

Frota-Pessôa, S.

Temos estudado, utilizando cálculos de estrutura eletrônica, o comportamento magnético e hiperfino de sistemas metálicos, em sua maioria bastante complexos. Frequentemente usamos método de primeiros princípios implementado no espaço direto, o que nos permite investigar sistemas com quebra de periodicidade. Estamos interessados em duas áreas principais: impurezas e defeitos em hospedeiros metálicos e em sistemas a suas dimensões (superfícies, multicamadas etc...) e defeitos nesses sistemas.

Temos mantido contato com vários grupos no Brasil e no exterior. Em 1998 mantivemos colaborações bastante produtivas com o grupo experimental do Hahn Meitner Institut, Berlim (Alemanha), liderado pelo Prof. Dietmar Riegel e com o Dr. Roberto Bechara Muniz da Universidade Federal Fluminense, Niterói (Brasil). Temos cooperado também com a Dra. Helena M. Petrilli do IFUSP.

i) Motivados por resultados experimentais interessantes obtidos pelo grupo do Prof. Dietmar Riegel (Hahn Meitner Institut, Berlim, Alemanha) temo utilizado o método RS-LMTO-ASA de primeiros princípios para investigar o comportamento magnético e hiperfino de impurezas substitucionais e intersticiais de elementos de transição, em hospedeiros metálicos através da Tabela Periódica. Hospedeiros de metal simples e de metal de transição estão sendo considerados. O objetivo principal é aclarar os mecanismos de formação de momento local no sítio da impureza nesses materiais.

ii) Ainda em colaboração com o grupo de Berlim, temos investigado o comportamento de pares de impurezas de transição em Cu, Ag e Au. Em particular, o par Fe-Cr em Au foi medido, apresentando resultados de campo hiperfino no Fe inesperados e interessantes, que procuramos explicar utilizando cálculos de estrutura eletrônica. O acoplamento magnético de troca J entre as impurezas do par tem um papel importante e também está sendo investigado.

iii) Através de cálculos de estrutura eletrônica, investigamos o comportamento magnético e hiperfino na região de impurezas de Sc, V, Cr, Mn, Co, Ni e Cu em ZrFe₂, um composto que forma em fase de Laves. O Mn, Co, Ni e Cu foram introduzidos no sítio do Fe enquanto que as demais impurezas, devido ao seu maior volume foram introduzidas também no sítio do Zr. Notamos que tratar impurezas isoladas em hospedeiros complexos não é simples e embora alguns cálculos usando aglomerados pequenos tenham sido efetuados, está é a primeira vez que um estudo de primeiros princípios envolvendo não só a impureza, mas a perturbação por ela introduzida nas várias camadas vizinhas é feito para sistemas metálicos complexos, isto é, binários com vários átomos por cela. Os resultados são comparados com dados experimentais da literatura.

O projeto teve a participação de Sérgio B. Legoas que, em maio de 1998, defendeu tese de doutoramento sobre o tema junto ao IFUSP.

iv) É sabido que uma impureza de Fe em Pd polariza os sítios vizinhos dando origem ao conhecido “*momento gigante*”. Neste projeto investigamos impurezas e “*adatoms*” de Fe em superfícies de Pd para verificar se ocorre fenômeno semelhante. Cálculos indicam que átomos de Fe colocados na superfície Pd(001) polarizam consideravelmente os vizinhos de Pd e dão origem a um momento bastante significativo. Impurezas e “*adatoms*” de Fe em superfícies de Pd(110) e Pd(111) também estão sendo investigados. Os resultados serão contrastados com os obtidos para monocamadas de Fe em superfícies de Pd. Camadas aleatórias de Fe_xPd_{1-x} em superfícies de Pd serão também estudadas utilizando códigos TB-LMTO-CPA. O projeto tem a participação de Ângela B. Klautau que elabora tese de doutoramento sobre o tema.

v) O Cr normalmente se ordena em um arranjo complexo, aproximadamente antiferromagnético com momento local da ordem de 0,6 mB. Foi observado que camadas finas de Cr na superfície (001) do Fe bcc apresentam momento local significativo. No entanto, dados recentes mostram que camadas de Cr colocadas entre duas superfícies de Fe (001) não parecem apresentar momento magnético local no Cr. Foi sugerido pelo grupo de Strassburg que a suspensão do momento do Cr se deve à rugosidade na interface Fe/Cr. No entanto, como o momento do Cr é muito sensível a pressão, uma pequena mudança do parâmetro de rede do Cr devido ao contato com o Fe pode também levar a uma perda do momento. Neste trabalho estudamos sandwiches e multicamadas de Fe/Cr introduzindo rugosidade e compressão. Nosso objetivo é entender melhor o papel de cada um desses efeitos na supressão do momento do Cr.

Este projeto tem a participação do Dr. Roberto Bechara Muniz (Universidade Federal Fluminense, Niterói), do Dr. Sérgio B. Legoas (UNICAMP, Campinas) e da doutoranda Ângela B. Klautau.

“Estudo de propriedades físicas de impurezas profundas em semicondutores”.

Assali, L.V.C.

Nosso interesse é estudar algumas propriedades físicas relacionadas com impurezas que introduzem níveis de energia profundos em semicondutores. O tipo de método teórico a ser utilizado é determinado pelas vantagens que cada tipo de simulação computacional oferece, assim como por suas limitações, na obtenção das propriedades nas quais estamos interessados. Destacamos:

a) O estudo do emparelhamento de átomos de ferro com aceitadores rasos, em silício, que é simulado baseando-se na cinética de reações de defeitos dentro de um modelo clássico. Consideramos a rede de Si estática e a interação entre esta e o átomo de Fe é simulada por um potencial do tipo Lennard-Jones suavizado. A interação entre as duas esferas carregadas (Fe_i e A_s) é descrita por dois termos, um que representa a energia de interação coulombiana e outro que representa o efeito de polarização induzida.

b) Cálculos de estrutura eletrônica de defeitos relacionados com metais de transição e terras raras em Si, Ge, GaAs e SiC têm sido efetuados utilizando-se um modelo de aglomerado molecular e mais recentemente, um modelo de super-célula (*large unit cell*). Iniciamos o estudo da estrutura eletrônica de impurezas substitucionais e intersticiais relacionados com metais de transição e terras raras em Si e SiC, trabalhando com super-células e dentro do formalismo FLAPW (*full-potential linear augmented-plane wave*). Este esquema permite também o estudo de relaxações e distorções do sistema com o que se obtém várias quantidades relevantes na caracterização dos centros, tais como parâmetros hiperfinos, desdobramentos devido ao acoplamento spin-órbita, etc. Parte deste projeto se refere à tese de doutoramento da estudante Karina O. Barbosa (CNPq) e está sendo desenvolvido em colaboração com a Profa. Wanda V.M. Machado.

“Estrutura Eletrônica e Processos Dinâmicos em Semicondutores”

Silva, A.J.R. da

Nosso interesse é o estudo teórico de processos dinâmicos (crescimento, difusão etc.) que ocorrem em semicondutores, tanto cristalinos como amorfos. A estrutura eletrônica do sistema é calculada através de métodos ab initio. Já os processos dinâmicos são estudados através de técnicas de simulação como dinâmica molecular, Monte Carlo ou Monte Carlo

cinético. Algumas das áreas que tenho trabalhado, em colaboração com o Prof. Adalberto Fazzio, são:

- i) Estudo dos estágios iniciais de crescimento de Ge em Si(100) através de cálculos *ab initio*;
- ii) Estudo da difusão de dopantes em Si, utilizando a técnica de Monte Carlo cinético;
- iii) Estudo do processo de amorfização e recristalização, utilizando potenciais empíricos;
- iv) Estudo de defeitos em semicondutores e ligas semicondutoras.

Além dessa área de pesquisa, gostaria de mencionar que tenho uma colaboração com o Prof. Marco A.P. Lima, da UNICAMP, para estudar processos de espalhamento de elétrons por moléculas.

“Propriedades magnéticas de complexos moleculares metálicos”

Machado, W.V.M.

A Ressonância Magnética Nuclear (NMR) tem se mostrado como sendo uma ferramenta muito versátil para elucidar problemas em várias áreas de estudo da química, biologia, medicina, assim como na área tecnológica. Por ser uma técnica não invasiva permite explorar estruturas moleculares mais complexas. O padrão do deslocamento químico (*chemical shifts*) fornece uma grande quantidade de informações sobre a topologia molecular. A habilidade que o campo magnético aplicado possui em induzir correntes eletrônicas na molécula, assim como a intensidade do campo magnético local nas posições nucleares, depende dos detalhes das estruturas eletrônicas perto do núcleo magnético em observação. O cálculo teórico do tensor blindagem magnética envolve técnicas quantum-mecânicas sendo que o esquema obtido deve ser invariante por uma transformação de *gauge*. Vários esquemas foram propostos para calcular as propriedades magnéticas e que contornassem o problema da escolha do *gauge*. Entre eles estão os conhecidos pelas siglas IGLO, GIAO, LORG e CSGT. Todas estas formulações foram agregadas ao esquema HF e, em geral, possuem o mesmo grau de desempenho. Estamos efetuando determinações teóricas das estruturas de equilíbrio de supramoléculas metálicas e posteriormente os cálculos das blindagens magnéticas em seus átomos utilizando o método CSGT. Neste caso estudamos complexos de Ru (II): [Ru(CN)-3(terpy)]- e [Ru(terpy)2] que contêm 2,2'-6',2" terpiridina (terpy). Este projeto está sendo desenvolvido conjuntamente com o Dr. J.A. Kintop e os Profs. H.E. Toma e M. Franco do Instituto de Química da USP onde as determinações experimentais são realizadas.

“Propriedades Eletrônicas e Estruturais de Sistemas Envolvendo Metais de Transição”

Petrilli, H.M.

Temos nos dedicado tradicionalmente ao estudo de propriedades locais em materiais metálicos através de cálculos teóricos de estrutura eletrônica de primeiros princípios. Através de diversas colaborações com grupos experimentais no Brasil e no exterior estudamos problemas envolvendo tanto pesquisa básica como aplicações tecnológicas. Utilizando diferentes abordagens para realizar simulações computacionais estudamos ligas de metais de transição, moléculas (principalmente com interesse biológico) e compostos isolantes envolvendo metais de transição. Nosso interesse principal está voltado ao estudo de diagramas de fases de compostos intermetálicos, propriedades magnéticas e propriedades hiperfinas. Procuramos explorar a combinação de cálculos quânticos de propriedades locais, que são acessíveis por diversas técnicas experimentais a cálculos de dinâmica molecular “*ab initio*”. Isto nos permite obter informações na escala atômica, sobre processos como por exemplo reações moleculares. Além disto, podemos contribuir para o desenho e identificação de compostos como por exemplo no estudo de radio-fármacos. Em particular destacamos os

seguintes trabalhos para os quais utilizamos os métodos PAW, FP-LAPW ou RS-LMTO-ASA conforme conveniente.

i) Magnetismo - Comportamento magnético local e propriedades hiperfinas para: impurezas metais de transição em hospedeiros metais de transição e metais nobres; sistemas granulares que apresentam magnetoresistência gigante tais como grãos de Co em Ag ou Cu. Este último projeto é desenvolvido pela estudante Renata N. Nogueira (FAPESP) como parte de sua tese de doutorado.

ii) Intermetálicos - Análise sistemática de compostos intermetálicos com as estruturas C16 e C11b e impurezas nestas ligas. Este trabalho é desenvolvido em colaboração com o Dr. Henrique Saitovich do CBPF no RJ e a Dra. Marta Marszalek de Cracóvia na Polónia e envolve o projeto de doutoramento do aluno Luis Alberto Terrazos Javier (CNPq). Numa outra linha estudo diagramas de fases da liga Fe-Mo-Al a partir de cálculos de primeiros princípios em colaboração com o Dr. Claudio G. Schoen do Departamento de Metalurgia da Escola Politécnica da USP, projeto este onde se desenvolve a tese de doutoramento do aluno Pablo G.G. Ormeño (CNPq).

iii) Momento de Quadrupolo Elétrico Nuclear - Combinando cálculos precisos de gradiente de campo elétrico no núcleo em moléculas diatômicas (GCE) com medidas de interações quadrupolares realizadas no Hahn-Meitner em Berlim determinamos os momentos de quadrupolo elétrico dos núcleos ^{35}Cl , ^{79}Br e ^{127}I . Este é um projeto em colaboração com o Dr. H. Haas de Berlim. Estamos estudando também outros núcleos em colaboração com físicos nucleares de Leuven na Bélgica e com a Profª. Alinka Lépine do IFUSP.

iv) Moléculas com Aplicações em Biologia e Medicina - Estudamos isótopos radioativos (Ag e Hg) ligados a compostos com aplicações em medicina (radio-fármacos) em colaboração com pesquisadores experimentais de Leipzig na Alemanha. Estudamos também cristais de L-alanina com impurezas de Fe em colaboração com o grupo de Mössbauer da CNEA na Argentina.

“Propriedades de Transportes em Pontos Quânticos”

Watari, K.

Um estudo sistemático do perfil realístico do potencial de confinamento lateral, de um ponto quântico, mostra que raramente ele será harmônico. Já foram estudados em função da concentração dos doadores, de dimensão e de diferença de potencial aplicado. Os cálculos estão sendo repetidos em função da temperatura. Além disso, desenvolvimento de um programa computacional para a obtenção de correntes de tunelamento está na fase final. Resultados preliminares para a curva característica IxV mostram que é possível identificar os mecanismos de tunelamento que contribuem para a estrutura fina presentes na curva característica.

Grupo de Transição de Fase e Supercondutividade

Coordenador: Carlos Castilla Becerra

“Determinação de Corrente Crítica em Sistemas Supercondutores Granulares”

Jardim, R.F. e Westphal, C.H.

A novidade no estudo do comportamento da corrente crítica supercondutora como função da temperatura nos supercondutores granulares $\text{Ln}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$; Ln=Pr, Nd, Sm, Eu está no fato de que para concentrações convenientes de Ce, é possível controlar a temperatura em que ocorre a transição para a fase supercondutora genuína e a temperatura na qual o efeito Josephson é observado. Esta facilidade permite o estudo das correspondentes correntes críticas supercondutoras separadamente e pode fornecer um completo diagrama de fases para o acoplamento do tipo Josephson.

“Produção e Caracterização de Óxidos em Sistemas Supercondutores Granulares”

Jardim, R.F. e Westphal, C.H.

Estamos estudando as propriedades macroscópicas de óxidos do tipo Ln M Ou; Ou; Ln=terra-rara, M=Ni, Cu, Mn. Estes compostos apresentam efeitos interessantes, como transição de metal-isolante, supercondutividade e efeitos de magneto resistência gigante. O nosso trabalho consiste em produzir e caracterizar estes compostos através de diversas técnicas experimentais, como difração de Raios X, microscopia eletrônica, análise térmica diferencial, termogravimetria, resistividade elétrica, susceptibilidade magnética, magnetoresistividade, etc.

“Produção de Amostras Mono e Policristalinas de Óxidos Supercondutores”

Becerra, C.C.; Jardim, R.F. e Westphal, C.H.

Esse estudo envolve a produção de grande parte dos materiais que são caracterizados em nosso laboratório. Contando com diversos fornos resistivos de alta temperatura (até 1700° C), o grupo está capacitado para a produção de amostras monocristalinas de óxidos de uma maneira geral. Os crescimentos desses monocristais são feitos pelo chamado método do fluxo. Paralelamente, o grupo também tem produzido amostras policristalinas de óxidos por diversos métodos alternativos, onde poderíamos citar alguns métodos químicos como coprecipitação e sol-gel. Entretanto, para que a produção de amostras de qualidade excelente tenha sucesso, estudos preliminares são regularmente feitos em nosso laboratório. Esses estudos envolvem diagramas de fase de materiais e estudos sistemáticos da cinética de formação de fases.

“Magnetismo em Sistemas Diluídos”

Paduan Filho, A ; Becerra, C. C. e Westphal, C.

Medidas de magnetização em compostos antiferramagnéticos diluídos. Medidas de momentos remanentes, diagrama de fases e transições magnéticas.

“Magnetismo em Sistemas Moleculares”

Paduan Filho, A e Becerra, C.C.

Estudos estão sendo desenvolvidos em sistemas organo-metálicos, por meio de medidas de Susceptibilidade Magnética e magnetização na presença de campos magnéticos. O projeto visa determinar as interações entre os íons magnéticos desses complexos.

“Estudo das Propriedades de Transporte e Magnéticas de Supercondutores e seus Precursores”

O Laboratório de Supercondutividade está apto para caracterizar materiais de uma maneira geral através de diversas técnicas, i.g. resistividade elétrica, magnetoresistividade,

susceptibilidade magnética ac e dc , número de Hall, curvas características $V \times I$, etc. Essas caracterizações podem, em geral, ser feitas em largas faixas de temperaturas e campos magnéticos. Em particular, O Grupo de Supercondutividade tem utilizado estas técnicas para obter informações sobre diversos tópicos de interesse em supercondutividade:

a) Propriedades gerais de redes desordenadas de junções Josephson

Esse tópico envolve um estudo sistemático do diagrama de fases $H \times T$ de amostras policristalinas de supercondutores óxidos de base Cu, suas propriedades magnéticas e de transporte etc.

b) Propriedades gerais do estado misto de supercondutores do tipo II

Esse tópico envolve a determinação de campos críticos, estudo da dinâmica de vórtices, determinação de correntes críticas, etc., em amostras mono e policristalinas de supercondutores de uma maneira geral.

Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas Coordenador: Nei Fernandes de Oliveira Jr.

“Estruturas Epitaxiais Semicondutoras”

Henriques, A B.; Souza, P.L. de (PUC/RJ); Yavich, B. (PUC/RJ); Tribuzy, C. (PUC/RJ); Hanamoto, L. (CAPES) e Faveron, R. (FAPESP).

Semicondutores fabricados por técnicas epitaxiais de crescimento são estudados através de suas propriedades ópticas e elétricas. As amostras, fabricadas por MOCVD, são caracterizadas por medidas de luminescência, transmissão óptica e absorção óptica, magnetoresistência, Raios X, capacitância-voltagem. Os experimentos são realizados em baixas temperaturas e campos magnéticos de alta intensidade, são desenvolvidos modelos teóricos: cálculo autoconsistente para a estrutura epitaxial através da solução simultânea das equações kp e de Poisson, cálculo da modalidade eletrônica em diversos regimes de espalhamento, modelagem de estruturas finitas, efeitos de superfície e investigação da interface entre dois materiais semicondutores, simulações de Monte Carlo para investigar os fenômenos de transporte elétrico, cálculo teórico dos espectros ópticos.

“Interações de Troca em Semicondutores Magnéticos Diluídos”

Oliveira Jr., N.F.; Bindilatti, V.; Ter Haar, E. (CNPq); Martin, R. V.; Shapira, Y. (Tufts University, USA), Gratens, X. (FAPESP); Malarenko Jr., H. (FAPESP) e Merino, R. A C (sem bolsa).

Os semicondutores magnéticos diluídos se constituem num ótimo sistema para o estudo de interações de troca entre os íons magnéticos numa matriz isolante. Este problema apesar de sua importância fundamental no magnetismo é ainda entendido basicamente em termos fenomenológicos, Experimentalmente, em geral, informações acerca de interações de troca em materiais são obtidos por meios indiretos. O fenômeno dos degraus de magnetização em sistemas magnéticos diluídos com interações antiferromagnéticas, entretanto, permite a medida direta de parâmetros de troca, se constituindo numa importante ferramenta de investigação neste campo. Usando nossa capacidade de magnetometria em temperaturas em torno de 20mk, com um magnetômetro de força operando num refrigerador de diluição plástico, estamos realizando um estudo sistemático de interações de troca

antiferromagnéticas em semicondutores magnéticos com Mn, Eu, Co, etc., em matrizes de semicondutores II-VI e IV-VI.

“Ultra-Baixas Temperaturas em Altíssimos Campos Magnéticos”

Oliveira Jr., N. F.; Bindilatti, V.; Ter Haar, E.; (CNPq); Martin, R.V. e Frossati, G. (Kamerling Onnes Lab).

O advento dos refrigeradores de diluição plástica, imunes ao aquecimento por correntes induzidas, ampliou consideravelmente as perspectivas experimentais envolvendo ultrabaixas temperaturas sob altos campos magnéticos. Depois de ter demonstrado a operacionalidade e confiabilidade deste novo tipo de refrigerador, O Grupo de Ultra-Baixas Temperaturas do IFUSP tem se dedicado ao desenvolvimento da técnica, visando sua aplicação em altíssimos campos magnéticos, tais como obtidos em ímãs híbridos e de campo pulsado.

Laboratório de Materiais Magnéticos

Coordenador: Frank Patrick Missell

“Magnetização Reversível e Irreversível em SmFeCo Nanocristalino via o Modelo de Preisach”

Cornejo, D.R. e Missell, F.P.

Consideramos a separação da magnetização em partes reversível e irreversível para ligas magneticamente duras de SmFeCo em termos de uma relação fenomenológica entre o campo magnético e as magnetizações reversível e irreversível. Isto requer o cálculo de uma nova função $\eta = (\partial M_{rev}/\partial M_{irr})H$ que descreve a dependência da magnetização reversível com a magnetização irreversível. Utilizando o modelo móvel de Preisach (MPM), demonstramos que $\eta = k_m \chi_{rev}$, onde χ_{rev} é a susceptibilidade reversível intrínseca e k_m é o parâmetro móvel, uma medida das interações de longa alcance do sistema. A determinação da constante de proporcionalidade entre η e χ_{rev} fornece uma maneira de estimar k_m para o sistema. Resultados experimentais de uma análise de Preisach foram obtidos para uma série de ligas nanocristalinas de SmFeCo de composição $Sm_{18}(Fe,Co)_{82}$. As previsões do MPM concordam muito bem com “minor loops”, curvas de Henkel e curvas de recuo determinados experimentalmente. Estimativas de k_m concordam bem com valores determinados numericamente usando o MPM. Valores experimentais para a magnetização reversível e irreversível concordam bem com curvas calculadas a partir do MPM. A histerese observada na magnetização reversível é uma manifestação do fato que $k_m \neq 0$ para estes materiais.

“Materiais Magnéticos Nanoestruturados”

Goya, G.F.

Os materiais granulares nanoestruturados possuem uma importância crescente tanto do ponto de vista teórico quanto experimental. A descoberta dos efeitos de magnetoresistência gigante (GMR) exchange bias e tunelamento quântico macroscópico neste tipo de sistemas atraíram ainda maior atenção devido às possíveis aplicações tecnológicas na área de gravação em meios magnéticos e fabricação de dispositivos magneto-ópticos. Os processos de relaxação magnética em nanopartículas são de interesse fundamental, pois eles influem na estabilidade dos meios magnéticos, enquanto o superparamagnetismo estabelece um limite fundamental no tamanho (portanto na densidade) de elementos magnéticos num dispositivo de gravação. Contudo, a relação destes fenômenos com a microestrutura e morfologia das nanopartículas

não tem sido ainda esclarecida, sendo objeto dos maiores esforços de pesquisa. A possível existência de transições tipo vidro de spin (SG) em sistemas nanoestruturados é um assunto ainda em debate, embora alguns trabalhos sugerem que o comportamento crítico em partículas quase isoladas é consistente com esta hipótese. É sabido que a frustração e a desordem necessárias para gerar um estado SG podem coexistir em sistemas nanoestruturados com interações dipolares. Porém, é preciso uma caracterização detalhada do comportamento magnético na região crítica (testando a hipótese de “scaling” universal) para determinar sem ambigüidades a existência de uma tal transição.

Como parte do grupo Mössbauer do LMM, temos nos dedicado á obtenção e caracterização magnética de compostos metálicos e cerâmicos nanoestruturados, tais como nanopartículas de Fe ou Ni em SiO₂, óxidos AB₂O₄ (com A e B metais de transição) e orthoferrites RFeO₃. Grande parte destes sistemas são obtidos pela técnica de mecanossíntese, com o propósito é a otimização dos parâmetros mecânicos e termodinâmicos na produção de sistemas nanoestruturados monofásicos e homogêneos, com controle das propriedades microestruturais e magnéticas. A caracterização das nanopartículas obtidas é feita utilizando análise térmica diferencial, difração de Raios X, espectroscopia Mössbauer, magnetização, suscetibilidade e magnetoresistência. A análise estrutural visa determinar as características das fases resultantes, entando que o estudo das propriedades magnéticas e de transporte tem como objetivo principal pesquisar as relações entre os efeitos de anisotropia unidirecional magnética e acoplamento de supertroca, em relação com o tipo de interação entre partículas determinantes do comportamento tipo vidro de spin e superparamagnético. Os mecanismos de transporte dos compostos resultantes são analisados em relação aos fenômenos magnéticos presentes em sistemas nanoestruturados, e os resultados comparados com modelos atuais tanto das partículas individuais (tipo 'caroço/superfície') quanto do comportamento coletivo (tipo 'vidro de spin').

“Viscosidade Magnética e Efeitos Dinâmicos em SmFeCo Nanocristalino via o Modelo de Preisach”

Cornejo, D.R.; Lo Bue, M. (IENGF, Torino, Itália); Basso, V. (IENGF, Torino, Itália); Bertotti, G. (IENGF, Torino, Itália) e Missell, F.P.

Amostras de SmFeCo nanocristalina contendo 10, 20, 30, e 40 at% Fe, preparadas por “mechanical alloying” e tratamento térmico, mostraram uma remanência elevada característica de acoplamento dos grãos via “exchange”. Começando do estado desmagnetizado ac, “minor loops” foram determinados para campos magnéticos de até 70 kOe, para cálculo numérico da função de Preisach $p(h_c, h_u)$. Os processos reversíveis e irreversíveis presentes na liga foram separados. O modelo movel de Preisach foi utilizado para simular vários aspectos estáticos da curva de histerese.

A viscosidade magnética foi determinada nas quatro ligas em torno do campo coercivo. O modelo foi estendido para descrever os efeitos de ativação térmica via uma equação de movimento para a linha $b(h_c, t)$ que descreve o estado do sistema no plano de Preisach. O formalismo descreve a viscosidade magnética em termos de um campo de flutuação H_f que varia com o material. O modelo também fornece uma descrição de efeitos dinâmicos associados às curvas de histerese, como, por exemplo, a dependência da curva de histerese com a taxa de variação do campo magnético externo ou a relaxação térmica após variações complicadas do campo magnético.

“Processos reversíveis e a viscosidade magnética em ímãs permanentes nanocristalinos”

Cornejo, D.R.; Villas-Boas, V. e Missell, F.P.

A determinação correta do parâmetro de viscosidade magnética S_V requer o cálculo de um novo parâmetro $\eta = (\partial M_{rev}/\partial M_{irr})H$ que descreve a dependência da magnetização reversível com a magnetização irreversível. Medidas da viscosidade magnética foram realizadas em 300K sobre a curva principal de desmagnetização de dois ímãs permanentes nanocristalinos : (i) $Pr_4Fe_{78}B_{18}$ produzido por resfriamento rápido e tratado com corrente e (ii) $Sm_{18}Fe_{33}Co_{49}$ produzido por moagem mecânica e posteriormente tratado termicamente. Mostramos que η é proporcional à susceptibilidade reversível η_{rev} , em boa concordância com as previsões do modelo móvel de Preisach. Medidas da susceptibilidade reversível foram feitas para determinar η . Valores experimentais de η são positivos na curva principal de desmagnetização para ambos os materiais, resultando em correções substanciais em S_V próximo ao H_C .

“Efeito da espessura da subcamada de Cr sobre as propriedades magnéticas de filmes de SmCo”

Romero, S.A.; Cornejo, D.R.; Neiva, A.C.; Rhen F°, F.M.; Missell, F.P. e Tabacniks, M.H.

Filmes de SmCo foram investigados como candidatos para mídia de gravação magnética. Filmes de Cr/SmCo_x/Cr sobre substratos de (100) Si foram produzidos com o substrato mantido em 350°C e com uma pressão de argônio de 5 mTorr. A subcamada de Cr foi depositada em temperaturas de 25° e 350°C e mostrou diferentes texturas. As espessuras das camadas foram estimadas de medidas de retroespalhamento Rutherford (RBS) e a textura dos filmes foi avaliada através de uma análise Rietveld de dados de difração de Raios X. A coercividade dos filmes era na faixa 4-8 kOe. Para uma camada de SmCo com espessura de 200 nm., a subcamada de Cr foi variada entre 75-300 nm para determinar o seu efeito sobre o acoplamento intergranular nos filmes. Para amostras termicamente desmagnetizadas, as curvas de remanência foram determinadas e utilizadas para determinar distribuições de campos de chaveamento e gráficos Δm . A textura da subcamada afeta as propriedades magnéticas mais do que a espessura da subcamada.

“Bicamadas de SmCo₅/Fe”

Cornejo, D.R.; Missell, F.P. e Fullerton, E.E. (IBM - Almaden).

Bicamadas consistindo de uma camada de um material magneticamente duro e outra de alta permeabilidade devem apresentar acoplamento entre as camadas devido a interação de “exchange”. Bicamadas de SmCo₅/Fe foram produzidos por “sputtering” em substratos de silício (IFUSP) e em MgO (IBM) com a intenção de estudar essa interação utilizando o modelo de Preisach.

“Estrutura cristalográfica e magnética de (Sm,Nd)₅(Fe,Ti)₁₇”

Missell, F.P.; Murakami, R.K.; Yelon, W.B. (MURR) e Chu, Z. (MURR)

Difração de nêutrons foi utilizada para refinar a estrutura cristalográfica e magnética de (Nd,Sm)₅(Fe,Ti)₁₇. Com teores de Sm acima de 30%, este material possui anisotropia uniaxial e, portanto, serve para a confecção de ímãs permanentes. Para as amostras estudadas aqui, com aproximadamente 30% Sm e 0-10% Ti, foi possível localizar os átomos de Sm na rede cristalográfica. Em amostras sem Ti, Sm prefer o sítio 2a onde possui somente terras raras como vizinhos. Os sítios 24l e 6g₂ também são preferidos pelos Sm. Quando Ti é adicionado à liga, Sm também é observado no sítio 4d. Os átomos de Ti preferem os sítios 12k₁, 12k₂, 12j₂, e 12j₄. A fase 5:17 em ligas contendo Ti é formada através da fase TiFe₂, em vez da fase 2:17.

“Estudo do sperimagnetismo em filmes amorfos de Dy-Co”

Tufaile, A.P.B. e Santos, A.D.

O MEK-bt foi utilizado pela bolsista Adriana P. B. Tufaile, durante o seu mestrado, no estudo do comportamento térmico e magnético do filme sperimagnético amorfo de DyCo₂. Neste caso vemos que as informações magnéticas obtidas via efeitos magnetoópticos, são exclusivamente devidas aos átomos de Co, pois o diodo laser utilizado ($\lambda = 670$ nm, $E = 1.85$ eV) não possui energia suficiente para ativar processos óticos nos elétrons magnéticos dos elementos de terras raras. A baixas temperaturas vemos curvas de histerese invertidas, indicando a preponderância da magnetização da sub-rede do Dy, enquanto acima da temperatura de compensação, T_{comp} , a magnetização da sub-rede do Co é dominante. Em torno de T_{comp} , que se encontra próximo de 200 K, vemos ciclos de histerese mostrando inversões (transições) de magnetização semelhantes aos ciclos das bicamadas acima. Inicialmente, relacionamos esses comportamentos a possíveis heterogeneidades (flutuações de composição ao longo da espessura) nas amostras. Porém, recentemente repetimos estas medidas, usando amostras produzidas por “sputtering” e obtivemos resultados semelhantes, o que nos coloca a possibilidade de parte destes efeitos serem fenômenos característicos da temperatura de compensação. Estes resultados demonstram a possibilidade de estar ocorrendo o fenômeno de “spin flipping”. Esta hipótese poderá ser testada em medidas de dicroísmo magnético circular de Raios X (XMCD).

“Estudos magneto ópticos espectrais em filmes amorfos de RE-Co”

Tufaile, A.P.B. e Santos, A.D.

Como parte do trabalho de doutorado da bolsista A. P. B. Tufaile, temos desenvolvido estudos magnetoópticos espectrais em filmes amorfos de RE-Co, onde RE= Y, Gd, Tb, Ho e Dy. Estudamos a dependência com o comprimento de onda, do sinal magnetoóptico relativo ao efeito Kerr transversal ($\Delta R/R$). Este tema tem uma forte importância tecnológica, pois considera-se que a tendência dos sistemas de gravação Magneto óptica é de evoluir para comprimentos de onda mais curtos, visando o aumento da densidade superficial de informações registradas. Recentemente demonstramos que o abaixamento do comprimento de onda leva a um aumento significativo do valor de $\Delta R/R$. Este resultado é bastante interessante, pois se contrapõe aos dados de literatura para o efeito Kerr polar, onde se observa uma redução do sinal magneto óptico. Dessa maneira, podemos continuar considerando essa classe de materiais como candidatas a mídia de gravação magneto óptica, quando do advento de diodos laser azuis.

“Estudo de filmes finos de Tb-Fe-Co”

Santi, C.E. e Santos, A.D.

Como parte do trabalho de mestrado do Sr. C. E. Santi, estamos estudando o comportamento magnético e magneto óptico de filmes finos de Tb_x(Fe_{1-y}Co_y)_{1-x}, com x e y entre 0,1 e 0,2. Esta classe de materiais tem alta importância tecnológica, pois está sendo usada atualmente como mídia de gravação magneto óptica. Usando o MEK-pol, estamos estudando o comportamento da sua anisotropia magnética.

“Estudo estrutural e magnético de filmes finos de Fe-Pt e Co-Pt”

Martins, A. e Santos, A.D.

Uma classe de filmes finos magnéticos, que apresenta anisotropia perpendicular e efeitos Kerr pronunciados e que poderia ser considerado como uma possível alternativa para a mídia de gravação magneto óptica a comprimentos de onda mais curtos é constituída por filmes cristalinos de Fe-Pt, Co-Pt e composições ternárias de Co-Fe-Pt.

No seu mestrado, a Srta. Simone C. Trippe iniciou os estudos de filmes finos de $\text{Fe}_x\text{Pt}_{1-x}$, com $x= 0,15 \sim 0,75$. Os filmes foram elaborados através da técnica de “magnetron sputtering”, a partir de alvos dos elementos puros. Como substratos usou-se silício (100), silício (111), SiO_2 e SiO_2 com um *buffer* de cerca de 500 Å de Pt, aquecidos a temperaturas de 200 e 300°C. Estes filmes foram caracterizados magneticamente através do magnetômetro de amostra vibrante (VSM) e estruturalmente por difração de Raios X. Observamos que existe uma tendência geral de crescimento dos filmes na direção [111]. Por outro lado, os filmes crescidos sobre o *buffer* de Pt apresentaram maior tamanho de grão.

“Difração Magneto óptica e Plasmons de Superfície em Redes de Partículas Magnéticas”

Souche, Y.; Santos, A.D.; Schoenmaker, J. e Nóbrega, L.N.

Durante meu estágio no LLN, realizado de julho a dezembro de 1999, continuei os estudos da difração Magneto óptica em redes de partículas magnéticas. Este estudo iniciou-se quando de minha primeira passagem pelo LLN, de 1991 a 1993. Temos estudado os efeitos magneto ópticos nas ordens de difração luminosa em redes bidimensionais de partículas magnéticas. A partir dos dados das ordens de difração pudemos estabelecer a estrutura média de domínios em partículas de dimensões micrométricas.

A dependência da intensidade luminosa das ordens de difração em relação ao ângulo de incidência, apresentam normalmente anomalias. Estas anomalias são classicamente associadas a redistribuição de energia quando do desaparecimento de ordens de difração. Como esta condição corresponde a um ângulo de emergência rasante, podemos considerar a possibilidade de geração de plasmons de superfície a partir desta ordem de difração. Se esses plasmons de superfície puderem ser criados, eles deveriam ter comprimentos de onda também característicos do período da rede de difração. Assim, poderia se esperar uma forte interação do plasmon com a rede de difração magnética, abrindo a possibilidade de se obter efeitos Kerr magnetoópticos exacerbados.

O estudo da existência destes plasmons de superfície têm um forte caráter especulativo. Utilizando um magnetômetro a efeito Kerr montado em um goniômetro, fizemos uma série de medidas de refletividade (R) e do sinal magneto-ótico ($\Delta R/R$) em função do ângulo de incidência e das diferentes ordens de difração. Observamos fortes anomalias tanto em R como em $\Delta R/R$, inclusive com inversões de sinal de $\Delta R/R$. Estamos no momento re-estudando a proposição inicial e procurando uma maneira de demonstrar que estas anomalias estão associadas a plasmons de superfície.

“Microscopia de Tunelamento Óptico - Modo Magneto óptico”

Souche, Y.; Santos, A.D. e Schoenmaker, J.

No LLN, trabalhei junto ao Dr. Souche, no desenvolvimento de um Microscópio de Tunelamento Óptico (SNOM), para ser operado no modo magnetoóptico (SNOM-MO). O SNOM é basicamente um Microscópio de Força Atômica (AFM), onde a ponta foi substituída por uma fibra óptica. Assim podemos iluminar a amostra através da abertura da fibra, que se encontra a uma distância nanoscópica da amostra. A luz refletida é enviada a uma fotomultiplicadora e analisada para a construção ponto-a-ponto da imagem. Para distâncias fibra/amostra desta ordem de grandeza, a interação da luz com a amostra se dá através de ondas evanescentes (não propagativas). Portanto, a resolução da imagem

construída, não tem sua resolução limitada a $\lambda/2$, como é característico das ondas luminosas propagativas. Ficando portanto, a resolução da imagem, definida pela abertura luminosa da fibra ótica e pelo método de varredura da amostra. Como o objetivo deste projeto é o de estudar materiais magnéticos, foi previsto a inserção de dispositivos de análise de polarização da luz refletida, em termos do efeito Kerr magnetoóptico transversal. Neste modo, em princípio se poderia obter informações sobre a estrutura de domínios de materiais que apresentem eixo de fácil magnetização no plano da amostra.

Este microscópio foi inteiramente construído no LLN, o que lhe dá flexibilidade para o desenvolvimento do projeto e teste de novas configurações. Ele utiliza um diodo laser vermelho ($\lambda = 635$ nm), fibras óticas monomodo, células foto-multiplicadoras e polarizadores à película. Para a obtenção de uma pequena abertura na fibra ótica, ela é estirada em uma estiradora de micropipetas. Assim obtemos um afinamento regular da ponta da fibra. Posteriormente é depositada obliquamente sobre a ponta da fibra, uma camada de Al, de tal maneira que reste uma pequena abertura na extremidade desta. Perfis de difração da luz na ponta da fibra nos indicam aberturas tipicamente da ordem de centenas de nm, o que consideramos suficiente para os testes iniciais. O modo AFM é obtido vibrando-se a fibra através de uma bilamina piezoelétrica e o sensoramento da amplitude de vibração é feito pela ressonância de um cristal de relógio de pulso, acoplado à fibra. No estágio atual, o modo AFM e o modo ótico estão funcionando corretamente, porém como o sinal magneto-ótico é da ordem de 0,1 a 1% do sinal ótico, a eletrônica de controle da varredura e altitude não está apresentando a *performance* necessária. Por outro lado, testes estáticos no modo magneto óptico nos permitiram extrair ciclos de histerese locais na amostra, o que demonstra a possibilidade de sensoriar magneticamente a amostra, através do efeito Kerr transversal, mesmo com ondas evanescentes.

“Espectroscopia Mössbauer aplicada ao estudo de cristalização de ligas amorfas”

Jesus; D.R. e Partiti, C.S.M.

Estamos estudando, por Espectroscopia Mössbauer, ligas metálicas amorfas de Fe do tipo $Fe_{78-x}Al_xSi_9B_{13}$ e temos como objetivo determinar o papel do alumínio nos processos de cristalização. Estamos investigando amostras que foram submetidas a processos de moagens distintos e explorando propriedades magnéticas relacionadas com mudanças de tamanho de grão. Ainda temos interesse na relaxação estrutural de ligas amorfas por determinação de θ_D da liga amorfa e da mesma liga tratada térmicamente abaixo da temperatura de cristalização. Estudos estruturais estão sendo feitos por meio de difração de Raios X.

“Incorporação de metais de transição em goethita”

Partiti, C.S.M.; Silva, M.L.M.C.; Enzweiler, J. (Geo-UNICAMP) e Oliveira, S.M.B. (IGUSP).

A Espectroscopia Mössbauer é uma das técnicas de caracterização utilizadas nesse projeto que inclui o estudo de amostras naturais e sintéticas de goethita. As amostras naturais, enriquecidas em Ni são provenientes do níquel oxidado depósito laterítico de níquel do Vermelho, Serra dos Carajás. Para fornecer curvas padrão às quais os estudos dos materiais naturais possam ser comparados e permitir o estudo da influência do tamanho dos cristais no processo de incorporação, propõe-se a preparação de goetitas sintéticas. As técnicas utilizadas foram: a difração de Raios X, Espectroscopia Mössbauer, Espectroscopia de Infravermelho e Espectroscopia EXAFS. Os espectros Mössbauer de seis amostras sintéticas com teores de Ni variando de 0 a 10 % foram medidos a 77 K e comparados com medidas de amostras naturais.

“Espectros Mössbauer de sedimentos de represas: aplicação ao estudo geoquímico do meio ambiente”

Partiti, C.S.M.; Franco, D.R. , Berquó, T. S. e Imbernon, R.A.L. (UMC).

A difração de Raios X e a Espectroscopia Mössbauer foram utilizadas para estudar amostras de sedimentos das Represas Billings e Guarapiranga, São Paulo. Foram medidas amostras coletadas em pontos diferentes das represas. Os difratogramas de Raios X mostraram diferenças de cristalinidade entre as amostras, presença de goethita em todas e apenas uma amostra apresenta os picos da hematita. Os espectros Mössbauer de todas as amostras apresentaram um dubleto que pode ser associado à ferrihidrita e um sexteto com valor de campo hiperfino associado à goethita. Algumas amostras apresentaram um sexteto associado à presença de hematita e as outras um sexteto com campo hiperfino mais baixo, provavelmente associado à goethita com impureza substitucional, pois as análises químicas mostraram que a amostra com maior porcentagem de metais pesados presentes apresenta campo hiperfino menor. É possível também observar que a amostra com maior presença de fósforo apresenta a maior proporção relativa de ferrihidrita em acordo com um trabalho publicado recentemente. Atualmente estamos estudando sedimentos de Taiaçupeba.

“Caracterização das propriedades magnéticas das Turfas do Médio Vale do Rio Paraíba do Sul, Estado de São Paulo: uma contribuição da Espectroscopia Mössbauer ao magnetismo ambiental”

Berquó, T.S. e Partiti, C.S.M.

O magnetismo ambiental é uma área de estudo multidisciplinar que investiga as propriedades magnéticas de materiais naturais que tenham sofrido, de alguma forma, influências do ambiente onde foi depositado. Sabe-se que as variações nas propriedades magnéticas podem ser correlacionadas com diferentes processos ambientais ou variações do clima da região de interesse. Neste trabalho pretende-se fazer um estudo de magnetismo ambiental, através da caracterização magnética das turfas do médio Vale do Rio Paraíba do Sul, tendo como principais objetivos fazer uma correlação paleoclimática e conhecer o comportamento dos minerais magnéticos em turfas.

“Propriedades magnéticas e estruturais de materiais magnéticos nanocristalinos à base de PrFeB com adição de Cr”

Barra-Barrera; A.D.; Murakami, R.K. e Villas-Boas, V.

O efeito da substituição parcial de Fe por Cr nas propriedades magnéticas e estruturais de ímãs nanocristalinos a base de NdFeB, obtidos via tratamento térmico convencional, foi estudado e encontrou-se que o Cr provoca uma drástica mudança na constituição das fases presentes nestes ímãs, bem como, um aumento da ordem de 100% no campo coercivo dos mesmos.

Fitas amorfas obtidas a partir de ligas com composições $\text{Pr}_5\text{Fe}_{77-x}\text{Cr}_x\text{B}_{18}$ ($x = 0, 1, 2, 2,5, 3, 4$ e 5) foram obtidas via solidificação rápida e posteriormente cristalizadas através de um tratamento térmico convencional e através de um tratamento no qual passam-se altas correntes pelas fitas (“flash annealing”), resultando em materiais nanocristalinos. A caracterização magnética (medidas de magnetização em função do campo aplicado e em função da temperatura) e estrutural (via difração de Raios X) desses materiais foi realizada. A composição que apresentou as melhores propriedades magnéticas foi $x = 3$ e será estudada em detalhes do ponto de vista magnético (medidas de campo coercivo em função da temperatura, medidas de espectroscopia Mössbauer) e do ponto de vista estrutural (medidas de microscopia eletrônica de transmissão e de varredura, e microscopia de força). O campo

coercivo da composição com $x=3$ é 50% maior do que o campo coercivo da composição análoga com Nd e 40% maior do que a composição com Pr e sem Cr.

Um estudo da viscosidade magnética e dos processos reversíveis e irreversíveis na composição otimizada também será realizado.

“Propriedades magnéticas de compostos intermetálicos $R_6Fe_{11-x}Al_{3+x}$ ”

Jonen, S.; Rechenberg, H.R. (IFUSP) e Campo, J. (ILL-Grenoble)

Amostras de $R_6Fe_{11-x}Al_{3+x}$ ($R = La$ ou Nd) foram preparadas por fusão em forno de arco e investigadas por magnetometria de amostra vibrante, SQUID, espectrometria Mössbauer e difração de nêutrons. Os compostos são antiferromagnéticos e apresentam uma transição metamagnética em campo aplicado da ordem de 2 T. Como o íon La^{3+} é não-magnético, é evidente que a origem do antiferromagnetismo nesses compostos está nas interações de troca Fe-Fe. Nos compostos com $R = Nd$, a presença da terra rara induz várias diferenças de comportamento magnético, que foram investigadas em detalhe, e que são atribuídas às interações de campo cristalino do íon Nd^{3+} .

“Espectroscopia Mössbauer de ^{119}Sn em ligas semi-Heusler de estanho”

Vieira, I.E.F. e Rechenberg, H.R.

Ligas de Heusler são compostos intermetálicos ternários X_2YZ , onde X e Y são elementos de transição 3d ou 4d e Z é um elemento sp. Ligas análogas do tipo XYZ, em que metade dos sítios X estão desocupados, são chamadas de semi-Heusler. Focalizando a atenção nas ligas pseudoternárias $(Co_{1-x}Ni_x)TiSn$, foi observado [1] que elas são ferromagnéticas e metálicas para $x < 0.5$, e não-magnéticas e semicondutoras para $x > 0.5$. Estamos complementando o estudo desses materiais através de medidas de efeito Mössbauer do ^{119}Sn , com a finalidade de obter uma sistemática da densidade eletrônica (*isomer shift*) e forças interatômicas (*fator de Debye-Waller*) no sítio do Sn.

Laboratório de Novos Materiais e Semicondutores
(LNMS-MBE)

Coordenador: José Roberto Leite

“Caracterização Óptica e Elétrica de Nitreto de Gálio e de suas Ligas”

Leite, J.R.; Tabata, A.; Lima, A.P.; Lischka, K.; (Universidade de Paderborn, Alemanha); Schikora, D. (Universidade de Paderborn, Alemanha); Galzerani, J.C. (UFSCar), Lemos, V. (UNICAMP), e As, D.J. (Universidade de Paderborn, Alemanha); Frey, T. (Universidade de Paderborn, Alemanha); Fernandez, J.R.L.; Noriega, O.C.; Chitta, V. (USF) e Silva, M.T.O.

Técnicas experimentais de espectroscopia Raman e micro-Raman, fotorefletância, fotoluminescência, de medidas elétricas, etc. estão sendo usadas para estudar as propriedades de GaN cúbico crescidos por MBE. Recentemente fônons nestas estruturas foram por nós observados pela primeira vez. A interpretação teórica dos fônons observados foi feita comparando com resultados anteriormente obtidos para este composto na estrutura hexagonal. Pretende-se otimizar a dopagem tipo n e tipo p neste material com o objetivo final de construir-se LEDs e Lasers operando na região do azul e UV.

“Crescimento, Caracterização e Aplicação em Dispositivos de Poços Quânticos Dopados com Delta em GaAs/InGaAs”

da Silva, E.C.F.; Tabata, A.; Quivy, A.A.; Ceschin, A.M.; Martini, S.; Dantas, N.O. (UFU) e Takahashi, E.K. (UFU).

A técnica de fotoluminescência é empregada para estudar as propriedades eletrônicas de poços quânticos delta dopados em $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ crescidos por MBE. Cálculos autoconsistentes da estrutura eletrônica dos sistemas são usados para a interpretação dos resultados experimentais. A perfeição das heteroestruturas é otimizada objetivando a fabricação de dispositivos eletrônicos tipo HEMT. A influência do efeito fotocondutivo na estrutura eletrônica dos sistemas é analisada.

“Estudo de Transporte Quântico e Efeito Hall Quântico nos Sistemas Quasi Tridimensionais (Poços Quânticos Parabólicos)”

Sérgio, C.S.; Gusev, G.M.; Leite, J.R.; Moshegov, N.T.; Kudryashev, V.N. e Toropov, A.I. (Institute of Semiconductor Physics, Novosibirsk, Rússia).

Os elétrons em um poço parabólico largo manifestam as características dos sistemas tri e bidimensionais. A idéia básica por trás dos poços quânticos parabólicos é criar um perfil de banda de condução $E(z)$ na direção de crescimento das heteroestruturas de $\text{GaAs}/\text{AlGaAs}$, através da variação conveniente da fração molar de Al de tal forma a reproduzir carga positiva. Esta pseudo carga, então, teria uma densidade proporcional à curvatura do potencial, fabricado no crescimento da amostra. Estudamos resistências diagonais e de Hall dos poços quânticos parabólicos com largura $w_e=1900\text{\AA}$ e mobilidade $65\times 10^3\text{cm}^2/\text{Vs}$. Medimos a dependência do mínimo de resistência como função da temperatura para níveis de Landau $i=1$ e 2 . Foi observado que a energia da ativação medida no experimento (0.02 meV) é bem menor que o valor esperado 7.1meV (para o "gap" de Landau). Ao mesmo tempo, as amostras mostram bem resolvidas oscilações de Shubnikov de Haas nos campos magnéticos baixos, que indicam boa qualidade das amostras. Estamos sugerindo que no campo magnético alto, as interações elétron-elétron suprimem quantizações dimensionais. A mínima $i=1$ desaparece, quando o campo magnético paralelo for aplicado. Estes resultados também confirmam nossas sugestões, o fato do comportamento do sistema ser mais próximo do comportamento dos sistemas tridimensionais do que bidimensionais.

“Estrutura Eletrônica e de Buracos em Super-Redes de Poços Quânticos de Materiais III-V e nitretos do grupo-III”

Scolfaro, L.M.R.; Rodrigues, S.C.P.; Sipahi, G.M.(USP-São Carlos) e Leite, J.R.

Utilizamos os modelos de Luttinger-Kohn e Kane e o método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ generalizados para o tratamento de heterointerfaces para obter as estruturas de bandas eletrônicas e de buracos em super-redes e poços quânticos, tais como $\text{GaAs}/\text{AlGaAs}$, $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$, AlGaN/GaN e GaN/InGaN não dopados e com diversos perfis de dopagem tipo-p (modulada na barreira e no poço, dopagem planar, etc.). Para as heteroestruturas dopadas, a equação da massa efetiva de multibandas é resolvida juntamente com a equação de Poisson, de maneira autoconsistente. Efeitos de tensão (*strain*), da inclusão da interação spin-órbita, e do uso de diferentes parâmetros de massa efetiva para os diferentes materiais são levados em conta. Espectros de luminescência e absorção ótica destas estruturas são também calculados e comparados com dados experimentais obtidos no laboratório LNMS.

“Investigação das Propriedades da Onda de Densidade de Spin em Poço Quântico Parabólico Largo”

Gusev, G.M.; Leite, J.R.; Bykov, A.A.; Moshegov, N.T.; Toropov, A.I. e Bakarov, A.K. (Institute of Semiconductor Physics, Novosibirsk, Rússia).

Mostrou-se, mais de 30 anos atrás, que, devido à interação elétron-elétron, um gás de elétrons uniforme 3D, em temperaturas suficientemente baixas, é instável para a formação de onda de densidade de spin (SDW) com vetor de onda paralelo à direção do campo magnético aplicado [4]. O vetor de onda da SDW é escrito como: $Q = k_{F+} + k_{F-}$, onde $k_{F\pm}$ (k_F) é o vetor de onda de Fermi dos elétrons que ocupam o nível de Landau com spin para cima (baixo). A onda de densidade de spin é fixa em um cristal por causa da interação com uma pequena e arbitrária densidade de impurezas. Neste caso, para um campo elétrico aplicado paralelo ao vetor de onda Q_x da SDW, a resistência elétrica deverá ser infinita. Por outro lado, a corrente que flui perpendicularmente ao Q_x não sofre dissipações, pois não é afetada pela SDW. Portanto, a resistência apresenta um comportamento anisotrópico quando o campo magnético, em relação à corrente, é aplicado paralelo ou perpendicularmente. Em casos em que o campo magnético é suficientemente intenso, mas os elétrons estão completamente spin polarizados, a SDW não é possível. Neste caso, prediz-se que haverá, simultaneamente, onda de densidade de carga com vetor de onda em várias direções. Investigamos comportamento anisotrópico da resistência elétrica quando o campo magnético, em relação à corrente, é aplicado paralelo ou perpendicularmente perto do fator de preenchimento de nível de Landau $N=1/3$. Cálculos teóricos suportam a possibilidade de se observar a *onda de densidade de spin* e *onda de densidade de carga* em poços quânticos parabólicos largos. Nós medimos poços quânticos parabólicos em campo magnético intenso paralelo de substrato em temperaturas muito baixas (50mK). Observamos anisotropia da resistência como foi previsto para onda de densidade de spin. Surpreendentemente, achamos esta anisotropia perto de fator de preenchimento 1/3. A origem deste comportamento da resistência poderia ser novo tipo de líquido de elétrons fortemente correlacionados.

“Investigação Magneto-óptica das Propriedades Estruturais e Eletrônicas de Interfaces em Poços Quânticos”

da Silva, E.C.F.; Cavalheiro, A.; Quivy, A.A. e Leite, J.R.

Estamos realizando um estudo detalhado das propriedades estruturais e eletrônicas de interfaces em quatro categorias de poços quânticos: 1) Na primeira categoria estão as estruturas onde as barreiras e os poços são formados por ligas binárias, isto é, os poços quânticos de AlAs/GaAs; 2) Na segunda categoria estão os sistemas onde a barreira é formada por uma liga binária e o poço por uma liga ternária (GaAs/InGaAs); 3) Na terceira categoria encontram-se os sistemas onde a barreira é formada por uma liga ternária e o poço uma liga binária (GaAlAs/GaAs); 4). Finalmente, serão analisados os sistemas com poços e barreiras formados por ligas ternárias (GaAlAs/InGaAs).

“Magnetotransporte e Efeito Hall no Campo Magnético Variável no Espaço”

Gusev, G.M.; Leite, J.R.; Bykov, A.A.; Moshegov, N.T.; Toropov, A.I.; e Bakarov, A.K. (Institute of Semiconductor Physics, Novosibirsk, Rússia).

Em campos magnéticos aleatórios com distribuição assimétrica em torno do valor médio zero $\langle \mathbf{B} \rangle = 0$, o movimento dos elétrons consiste na percolação de trajetórias com “formas” de cobras ao longo do contorno $B=0$, fechadas em torno de colinas ou vales da superfície do campo magnético e tunelando perto de pontos de sela. Existe alguma possibilidade de obter-se corrente Hall não nula para $\langle B \rangle = 0$. De forma simplista, consideremos a situação em que o raio de ciclotron médio R_c é menor que a metade da periodicidade do campo magnético d , mas a amplitude do campo magnético não é alta, de forma que $d/4 < R_c < d/2$. A assimetria na propagação das trajetórias com forma de cobra pode conduzir a uma voltagem Hall não

zero. Essa assimetria aparece na diferença do gradiente de campo para diferentes trajetórias de cobra chirais. Os estados de cobra, deslocando-se nas direções negativa e positiva, estão separados espacialmente. Essas trajetórias podem viajar em um gradiente de campo muito diferente e, portanto, têm velocidades diferentes. Devido às rugas estarem orientadas na direção perpendicular aos contatos, as trajetórias cobra contribuem diretamente com o efeito Hall. Por conseguinte, a corrente líquida em tais estruturas não é balanceada e, portanto, aparece uma voltagem Hall não nula.

“Propriedades de “Bulk”, de Defeitos, de Impurezas, de Superfícies e de Crescimento de Nitretos do Grupo III e de suas Heteroestruturas”

Leite, J.R.; Scolfaro, L.M.R.; Teles, L.K.; Marques, M.; Ramos, L.E.; Castineira, J.L.P. (UFU); Lischka, K. (Univ. de Paderborn, Alemanha); Schikora, D. (Univ. de Paderborn, Alemanha); Bechstedt, F. (Univ. de Jena, Alemanha); Alves, J.L.A. (FUNREI) e Alves, H.W.L. (FUNREI).

Cálculos de estrutura eletrônica, e de propriedades relacionadas, dos chamados “wide-gap” semicondutores da família dos Nitretos (*GaN*, *AlN*, *InN*, *BN*) e das ligas envolvendo os mesmos, bem como de heteroestruturas deles derivadas, estão sendo efetuados através dos métodos, de primeiros princípios FLAPW, e pseudopotencial VASP. São estudados o crescimento de camadas epitaxiais, superfícies, interfaces, impurezas, defeitos, bem como as propriedades termodinâmicas, estruturais e eletrônicas destes sistemas.

“Propriedades Termodinâmicas, Eletrônicas e Estruturais de Ligas Ternárias e Quaternárias de Compostos Semicondutores derivados de Nitretos do Grupo-III”

Scolfaro, L.M.R.; Marques, M.; Teles, L.K.; Leite, J.R.; Bechstedt, F. (Univ. de Jena, Alemanha) e Ramos, L.E.

Estão sendo estudadas as propriedades estruturais, eletrônicas e termodinâmicas de ligas quaternárias tipo $\text{In}_x\text{Al}_{1-x-y}\text{Ga}_y\text{N}$ na fase cúbica através do método *ab initio* de cálculo de estrutura eletrônica pseudopotencial VASP acoplado a um método de expansão em “clusters”, o da aproximação quase-química generalizada para o tratamento dos efeitos de desordem e flutuações na liga. Diversas quantidades são obtidas: parâmetros de rede e flutuações nos mesmos, distâncias de ligação, energias de coesão, “bulk modulus”, diagramas de fase, “gap” de energia, etc. Os estudos estão também sendo estendidos a heteroestruturas tipo InAlGaN/GaN com a inclusão de efeitos do “strain” biaxial nas simulações teóricas da liga. As ligas ternárias, sub-produtos da liga quaternária, são também analisadas.

“Transporte Eletrônico em Sistemas Bidimensionais e Quase Tridimensionais em Redes de Antipontos (Antidots)”

Sotomayor Choque, N.M.; Gusev, G.M.; Leite, J.R.; Bykov, A.A.; Moshegov, N.T.; Toropov, A.I. e Bakarov, A.K. (Institute of Semiconductor Physics, Novosibirsk, Rússia).

Nós estudamos o comportamento dos picos de comensurabilidade em sistemas de antipontos 2D na presença de campos magnéticos com componentes paralelos à superfície das amostras. Para isto, foram fabricadas quatro amostras com períodos de antipontos de 0.5, 1.0, 1.5, e 2.0 μm . Observamos dois picos de comensurabilidade para cada uma das medidas, a amplitude deles é maior para a amostra com período de 0.5 μm , e eles tendem a diminuir com o aumento de d , o mesmo acontecendo com largura dos picos. Observamos também o deslocamento do pico de campo baixo para campos mais altos de acordo com o aumento do período da rede. A partir da análise dos resultados das medidas experimentais podem se

inferir três fatos importantes: o primeiro é o deslocamento dos picos de comensurabilidade para regiões de campos mais altos, com o aumento do valor da componente paralela do campo magnético. O segundo fato observado nas medidas das quatro amostras é o alargamento dos picos de comensurabilidade também com o aumento da componente paralela e o terceiro fato de interesse observado é o aparecimento de novos picos de comensurabilidade na presença de campos magnéticos paralelos muito intensos. Isso pode ser observado nitidamente no caso da amostra com $d = 0.5 \mu\text{m}$. Também nesta amostra foi observada a diminuição da amplitude do pico de ressonância com o aumento da componente paralela do campo magnético. A aproximação empregada baseia-se na mudança anisotrópica da massa efetiva eletrônica na direção x para simular o efeito da distorção do contorno de Fermi. Desta forma, as trajetórias eletrônicas terão uma forma elíptica próxima das trajetórias reais que têm a forma de um “*oval de Cassini*”. Esta aproximação permitiu a realização de cálculos de magnetoresistência em campos inclinados, permitindo observar de forma aproximada os mesmos efeitos observados nas medidas experimentais. Nós investigamos também as oscilações anômalas da magnetoresistência em campo baixo dos poços quânticos parabólicos largos. Nós atribuímos essas oscilações a efeitos de tamanho devido à comensurabilidade entre o raio do ciclotron e a largura do poço.

4c - Projetos de Pesquisa com Financiamento Externo:

Adalberto Fazzio

Título: Auxílio à Pesquisa: “Estudo de Materiais: Propriedades Eletrônicas e Estruturais”

Fonte: FAPESP

Montante: R\$ 11.570,67 + US\$ 28,601.47 + US\$ 325.20

Período de Vigência: de 01 de maio de 1999 a 30 de abril de 2001.

Título: “Métodos e Algoritmos de ‘Escala-Múltipla’ para Materiais”

Fonte: PRONEX

Montante: R\$ 250.000,00

Período de Vigência: de 04 de outubro de 2000 a 04 de outubro de 2005 (concedido em 1999).

André Bohomoletz Henriques

Título: Auxílio à Pesquisa: “Propriedades Eletrônicas de Super-Redes Semicondutoras”

Fonte: FAPESP

Montante: R\$ 22.000,00 + US\$ 35,884.00

Período de Vigência: de 01 de outubro de 2000 a 31 de setembro de 2001.

Título: “Auxílio à Pesquisa em Materiais Semicondutores”

Fonte: PRÓ-REITORIA DE PESQUISA-USP

Montante: US\$ 3.500,00

Período de Vigência: de 01 de outubro de 2000 a 31 de setembro de 2001.

Antônio Domingues dos Santos

Título: Auxílio à Pesquisa “Estudo magneto-óptico de redes de partículas magnéticas microscópicas”

Fonte: FAPESP 99/06503-8

Montante: R\$ 12.000,00 + Reserva Técnica R\$ 16.747,55 + US\$ 28.942,23

Período de vigência: de julho de 1999 a setembro de 2001.

Antônio José Roque da Silva

Título: Auxílio à Pesquisa: “Estudo de Processos em Superfícies de Semicondutores”

Fonte: FAPESP

Montante: R\$ 6.602,30 + US\$ 23.683,27

Período de Vigência: de 01 de julho de 1998 a 28 de fevereiro de 2001.

Armando Corbani Ferraz

Título: “Propriedades Eletrônicas e Estruturais em Superfícies, Interfaces e Sólidos Semicondutores”

Fonte: CAPES/PROCAD

Montante: R\$ 111.000,00

Período de Vigência: 01 de dezembro de 2000 a 31 de dezembro de 2004.

Carlos Castilla Becerra

Título: “Magnetismo em Antiferromagnetos diluídos”

Fonte: CNPq/CSIC (Espanha) - Proc. 91099/98-7

Montante: R\$ 5.000,00 + US\$ 6.000,00

Período de Vigência: de janeiro de 2001 a dezembro de 2002.

Euzi Conceição Fernandes da Silva

Título: Projeto de Apoio a Grupos de Pesquisa: “Estudo Experimental e Teórico de Nanoestruturas Epitaxiais Semicondutoras derivadas de Compostos III-V”

Fonte: PRÓ-REITORIA DE PESQUISA-USP

Montante: R\$ 3.500,00

Período da Vigência: 2001.

Título: “Investigação óptica das propriedades eletrônicas em poços quânticos com dopagem planar na barreira e em pontos quânticos”

Fonte: FAPESP

Montante: R\$ 6.475,00

Período da Vigência: de setembro de 2000 a setembro de 2001.

Frank Patrick Missell

Título: “Aplicação do Modelo de Preisach a Bicamadas Magnéticas”

Fonte: FAPESP

Montante: R\$ 29.422,68 + US\$ 41.191,00

Período de Vigência: de 01 de setembro de 2000 a 30 de agosto de 2001.

Gerardo Fabián Goya

Título: “Mecanosíntese e Caracterização de Materiais Magnéticos Nanoestruturados”

Fonte: FAPESP 01/02598-3

Montante: R\$ 23.798,23 + US\$ 37.098,76

Período de Vigência: de maio de 2001 a abril de 2003.

Título: “Fluidos Magnéticos: Magnetismo de Nanoestruturas e Estabilidade Coloidal”

Fonte: CAPES (PROCAD) USP-UNB

Montante:

Período de Vigência: de 2001 a 2003.

Guennadii Michailovitch Gusev

Título: “Mesoscopic vertical transport in superlattices and multilayered semiconductor structures”

Fonte: USP/COFECUB

Montante: R\$ 7.000,00

Período de Vigência: 2001.

Helena Maria Petrilli

Título: “Mapeamento Teórico Sistemático da Relação Estrutura-Função em Polímeros Conjugados de Interesse Tecnológico”

Fonte: PRÓ-REITORIA DE PESQUISA-USP

Montante: R\$ 3.500,00

Período de Vigência: 2001.

Hercílio Rodolfo Rechenberg

Título: “Espectroscopia Mössbauer Aplicada ao Estudo de Materiais”

Fonte: PROJETO TEMÁTICO FAPESP

Montante: R\$ 164.944,00 + US\$ 78.426.00

Período de Vigência: de 1998 a 2001.

José Roberto Leite

Título: “Crescimento, Propriedades Estruturais, Óticas e de Transporte de Nanoestruturas Semicondutoras derivadas de Compostos III-V”

Fonte: PRONEX

Montante: R\$ 606.000,00

Período de Vigência: de 2000 a 2003 (concedido em 1998).

Título: “Estudo Experimental e Teórico de Nanoestruturas Epitaxiais Semicondutoras derivadas de Compostos III-V”

Fonte: PROJETO TEMÁTICO FAPESP

Montante: R\$ 248.430,95 + US\$ 529,403.00 (Aditivo: US\$117,185.00)

Período da Vigência: de 1999 a 2003.

Título: Projeto de Apoio a Grupos de Pesquisa: “Estudo Experimental e Teórico de Nanoestruturas Epitaxiais Semicondutoras derivadas de Compostos III-V”

Fonte: PRÓ-REITORIA DE PESQUISA-USP

Montante: R\$3.500,00

Período da Vigência: 2001.

Lucy Vitória Credidio Assali

Título: Auxílio à Pesquisa: “Propriedades Eletrônicas e Estruturais de Defeitos Profundos em Materiais Semicondutores”

Fonte: FAPESP

Montante: R\$ 17.721,88 + US\$ 27,309.23

Período de Vigência: de 01 de setembro de 1999 a 31 de agosto de 2001.

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Título: Projeto de Apoio a Grupos de Pesquisa: “Estudo Experimental e Teórico de Nanoestruturas Epitaxiais Semicondutoras derivadas de Compostos III-V”

Fonte: PRÓ-REITORIA DE PESQUISA-USP

Montante: R\$3.500,00
Período da Vigência: 2001.

Título: “Propriedades Estruturais, Eletrônicas e Vibracionais de Semicondutores “Bulk” e Heteroestruturas Semicondutoras Derivadas de Compostos III-V”

Fonte: FAPESP

Montante: R\$40.680,90 + US\$56,860.61

Período da Vigência: de 27 de fevereiro de 1999 a 28 de fevereiro de 2002.

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

Título: “Pesquisa em Semicondutores em Baixas Temperaturas e Campos Magnéticos Intensos”

Fonte: FAPESP

Montante: R\$ 887.536,74 + US\$ 896.290,50

Período de Vigência: de junho de 2000 a maio de 2004.

Título: “Pesquisas em Baixas Temperaturas e Campos Magnéticos Intensos”

Fonte: PRONEX

Montante: R\$ 400.000,00

Período de Vigência: de dezembro de 1996 a dezembro de 2001.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Título: Projeto Temático: “Estrutura Eletrônica de Líquidos Moleculares. Estudo de Efeitos de Solventes e Fenômenos Quânticos em Biologia Molecular”

Fonte: FAPESP

Montante: R\$ 104.266,37 + US\$ 114.711,05

Período de Vigência: de 01 de março de 1999 a 31 de maio de 2002.

Título: “Molecules in Condensed Phases. Structure and Dynamics of Excited States”

Fonte: CAPES/DAAD/PROBRAL

Montante: R\$ 43.761,00

Período de Vigência: de fevereiro de 2000 a fevereiro de 2002.

4d - Estágios e Visitas Científicas:

Adalberto Fazzio

Visita de colaboração científica.

Computational Materials Science Group, National Renewable Energy Laboratory, Colorado, EUA.

Período: de 11 a 14 de abril de 2001.

Participar da cerimônia de posse dos novos acadêmicos.

Academia Brasileira de Ciências, Rio de Janeiro, RJ.

Período: de 28 a 29 de maio de 2001.

Participar de uma reunião do Comitê de Assessoramento de Física e Astronomia.

CNPq, Brasília, DF.

Período: de 03 a 08 de junho de 2001.

Participar de uma reunião do Comitê Multidisciplinar de Articulação (CMA).
CNPq, Brasília, DF.
Data: 15 de agosto de 2001.

Participar de um intercâmbio científico, no âmbito do Projeto CAPES/PROCAD.
Departamento de Ciências Físicas da Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG.
Período: de 01 a 15 de setembro de 2001.

Participar de uma reunião do Comitê Multidisciplinar de Articulação (CMA).
CNPq, Brasília, DF.
Período: de 25 a 26 de setembro de 2001.

Participar de uma reunião sobre “Redes de Nanomateriais”.
Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS, Campinas, SP.
Período: de 24 a 26 de outubro de 2001.

Participar de uma reunião de diretores dos institutos de física.
Centro Brasileiro de Pesquisas Física - CBPF, Rio de Janeiro, RJ.
Período: de 31 de outubro a 01 de novembro de 2001.
Participar de uma reunião da Comissão de Avaliação das Bolsas CNPq/PIBIC.
CNPq, Brasília, DF.
Período: de 26 a 30 de novembro de 2001.

André Bohomoletz Henriques

Participar do processo de fabricação de micro contatos em amostras semicondutoras, coleta de amostras, discussão de resultados e planejamento de experimentos.
Pontifícia Universidade Católica, Rio de Janeiro, RJ.
Data: 17 de agosto de 2001.

Armando Corbani Ferraz

Participar de um intercâmbio científico, no âmbito do Projeto CAPES/PROCAD.
Departamento de Ciências Físicas da Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG.
Período: de 02 a 06 de julho de 2001.

Visita de colaboração científica.
Grupo do Prof. Dr. G.P. Srivastava da Universidade de Exeter, Exeter, UK.
Período: de 14 a 21 de setembro de 2001.

Carlos Castilla Becerra

Visita de colaboração científica.
Instituto de Ciência de Materiales de Aragon e a Universidade de Zaragoza, Espanha.
Períodos: (a) de 11 a 13 de novembro; (b) de 21 a 24 de novembro de 2001.

Visita de colaboração científica
Instituto Laue Langevin, Grenoble, França.
Período: de 14 a 20 de novembro de 2001.

Frank Patrick Missell

Visita de colaboração científica.
Thin Film Laboratory da Universidade da Califórnia, San Diego, CA, EUA.
Período: de 27 de julho a 30 de agosto de 2001.

Guennadii Michailovich Gusev

Visita de colaboração científica, no âmbito do Projeto de Pesquisa USP/COFECUB.
High Magnetic Field Laboratory, Grenoble, França.
Período: de 07 a 28 de janeiro de 2001.

Visita de colaboração científica.
Institute of Semiconductor Physics, Russian Academy of Science, Novosibirsk, Rússia.
Período: de 14 de julho a 03 de agosto de 2001.

Visita de colaboração científica, no âmbito do Projeto de Pesquisa USP/COFECUB.
High Magnetic Field Laboratory, Grenoble, França.
Período: de 02 a 23 de dezembro de 2001.

Helena Maria Petrilli

Visita de colaboração científica.
Universidade de Lille, Lille, França.
Períodos: (a) de 09 a 11 de janeiro; (b) de 24 de janeiro a 09 de fevereiro de 2001.

Visita de colaboração científica.
Universidade de Graz, Graz, Áustria .
Períodos: (a) de 10 a 13 de janeiro; (b) de 22 a 23 de janeiro de 2001.

Visita de colaboração científica.
Grupo da Profa. Dra. Elisa Molinaria, Universidade de Modena, Modena, Itália.
Período: de 18 a 20 de janeiro de 2001.

Visita de colaboração científica.
Universidade de Lille, Lille, França.
Períodos: (a) de 02 a 13 de maio; (b) de 21 a 25 de maio de 2001.

Hercílio Rodolfo Rechenberg

Visita de colaboração científica.
Laboratório de Magnetismo do Instituto de Ciência de Materiais de Aragon, Universidade de Zaragoza, Zapagoza, Espanha.
Período: 24 de junho a 02 de julho de 2001.

José Roberto Leite

Participar do processo de seleção do edital 2001 (CNPq/PIBIC) e do Congresso de Iniciação Científica, CNPq, Brasília, DF.
Período: de 26 a 27 de junho de 2001.

Visita de colaboração científica.
Naval Research Laboratory, Washington D.C., EUA.
Período: de 09 a 13 de julho de 2001.

Visita de colaboração científica.
Laboratório de Optoeletrônica da Universidade de Paderborn, Paderborn, Alemanha.
Período: de 30 de julho a 03 de agosto de 2001.

Lucy Vitória CredidioAssali

Visita de colaboração científica.

Grupo do Prof. Dr. Matthias Scheffler no Fritz-Haber-Institut - Max-Planck-Gesellschaft, Berlin, Alemanha.

Período: de 10 a 15 de julho de 2001.

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Visita de colaboração científica.

Naval Research Laboratory, Washington D.C., EUA.

Período: de 10 a 12 de julho de 2001.

Visita de colaboração científica.

Grupo Teórico de Física do Estado Sólido do Prof. Dr. Friedhelm Bechstedt, Friedrich-Schiller-Institut, Universität Jena, Jena, Alemanha.

Período: de 26 a 29 de julho de 2001.

Visita de colaboração científica.

Grupo de optoeletrônica do Prof. Dr. Klaus Lischka, Universidade de Paderborn, Paderborn, Alemanha.

Período: de 30 de julho a 03 de agosto de 2001.

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

Visita de colaboração científica.

Grupo do Prof. Dr. Yaacov Shapira da Tufts University, EUA.

Período: de 26 a 28 de abril de 2001.

Visita à Criogenics Ltda, Inglaterra.

Período: 30 de abril de 2001.

Visita de colaboração científica.

Prof. Dr. Giorgio Frossati da Universidade de Leiden, Leiden, Holanda.

Período: de 01 a 05 de maio de 2001.

Participar da cerimônia de posse dos novos acadêmicos.

Academia Brasileira de Ciências, Rio de Janeiro, RJ.

Período: de 28 a 29 de maio de 2001.

Visita à Criogenics Ltda, Inglaterra.

Período: de 04 a 05 de outubro de 2001.

Visita de colaboração científica.

Prof. Dr. Giorgio Frossati da Universidade de Leiden, Leiden, Holanda.

Período: de 06 a 09 de outubro de 2001.

Visita de colaboração científica.

Grupo do Prof. Dr. Yaacov Shapira da Tufts University, EUA.

Período: de 10 a 13 de outubro de 2001.

Visita de colaboração científica.

Grupo do Prof. Dr. Yaacov Shapira da Tufts University, EUA.

Período: de 19 de dezembro de 2001 a 05 de janeiro de 2002.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Visita de colaboração científica.

Gupo do Prof. Dr. Florian Muler-Plathe, Masx-Planck-Institut fur Polymerforschung, Mains, Alemanha.

Período: de 06 de janeiro a 04 de fevereiro de 2001.

Participar de uma reunião preparatória para a Avaliação 2001 dos Cursos de Pós-Graduação, CAPES, Brasília, DF..

Período: de 15 a 18 de abril de 2001.

Participar de uma reunião da Comissão de Avaliação da Pós-Graduação, CAPES, Brasília, DF.

Período: de 03 a 08 de junho de 2001.

Visita de colaboração científica.

Grupo do Prof. Dr. Geerd H.F. Diercksen, Max-Planck-Institut für Astrophysik, Garching, Alemanha.

Período: de 07 de julho a 07 de agosto de 2001.

Participar de uma reunião sobre o julgamento de Projetos Temáticos da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ.

Período: de 23 a 24 de agosto de 2001.

Participar de uma reunião dos Comitês de Assessoramento no CNPq, Brasília, DF.

Período: de 10 a 14 de setembro de 2001.

Participar de uma reunião da CAPES, com o objetivo de analisar os recursos dos programas de pós-graduação, Brasília, DF.

Período: de 08 a 10 de outubro de 2001.

Participar de um evento em comemoração aos 30 anos do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE.

Período: de 25 a 28 de outubro de 2001.

Participar de uma reunião do Comitê Assessor de Física/Astronomia, CNPq, Brasília, DF.

Data: 25 a 30 de novembro de 2001.

4e - Participação em Reuniões Científicas Internacionais:

Adalberto Fazzio

10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics.

Guarujá, SP.

Período: de 24 a 27 de abril de 2001.

Spring 2001 Meeting Materials Research Society.

San Francisco, CA, EUA.

Período: de 16 a 20 de abril de 2001.

School on Computational Physics Conference.

Brasília, DF.

Período: de 19 a 23 de agosto de 2001.

André Bohomoletz Henriques

10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics.

Guarujá, SP.

Período: de 24 a 27 de abril de 2001.

Antônio José Roque da Silva

19th European Conference on Surface Science.

Madrid, Espanha.

Período: 05 a 08 de setembro de 2000.

American Physical Society Conference - March Meeting 2001.

Seattle, Washington, EUA.

Período: de 12 a 16 de março de 2001.

3rd Brazilian - German Workshop on Applied Surface Science.

Florianópolis, SC.

Período: de 05 a 06 de março de 2001.

School on Computational Physics Conference.

Brasília, DF.

Período: de 19 a 24 de agosto de 2001.

International Workshop on Device Technology.

Porto Alegre, RS.

Período: de 02 a 06 de setembro de 2001.

Armando Corbani Ferraz

20th European Conference on Surface Science - ECOSS-20.

Krakow, Polônia.

Período: de 05 a 09 de setembro de 2001.

2nd International Seminar on Semiconductor Surface Passivation - SSP 2001.

Ustron, Polônia.

Período: de 10 a 13 setembro de 2001.

Armando Paduan Filho

46th Annual Conference on Magnetism & Magnetic Materials.

Seattle, EUA.

Período: de 09 a 18 de novembro de 2001.

Carmen Silvia de Moya Partiti

International Conference on the Applications of the Mössbauer Effect - ICAME'2001.

Oxford, Reino Unido.

Período: de 31 de agosto a 08 de setembro de 2001.

Euzi Conceição Fernandes da Silva

International Ibero American School on Epitaxial Growth of Semiconductor Nanostructures - EICENS'1.

Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP.

Período: de 19 a 23 de novembro de 2001.

Frank Patrick Missell

8th Joint MMM-Intermag Conference.

San Anonio, Texas, EUA.

Período: de 06 a 13 de janeiro de 2001.

Gerardo Fabián Goya

International Symposium on Metastable, Mechanically Alloyed and Nonocrystalline Materials - ISMANAM'2001.

Ann Arbor, EUA.

Período: de 24 a 29 de junho de 2001.

I Workshop on Metastable and Nanostructured Materials - NANOMAT' 2001.

Águas de São Pedro, SP.

Período: de 16 a 17 de agosto de 2001.

2nd Iberoamerican Worskhop on Nanostructure for Applications in Micro and Optoelectronics.

INPE, São José dos Campos, SP.

Período: de 26 a 28 de novembro de 2001.

Guennadii Michailovitch Gusev

14th International Conference on the Electronic Properties of Two-Dimensional Physics - EP2DS-14.

Praga, República Tcheca.

Período: de 30 de julho a 03 de agosto de 2001.

International Ibero American School on Epitaxial Growth of Semiconductor Nanostructures - EICENS'1.

Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP.

Período: de 19 a 23 de novembro de 2001.

Helena Maria Petrilli

Conference on Applied Density Functional Theory 2001.

Viena, Áustria.

Período: de 13 a 17 de janeiro de 2001.

XXXVI Zakopane School of Physics - International Conference on Condensed Matter Studies by Nuclear Methods.

Cracóvia, Polônia.

Período: de 14 a 19 de maio de 2001.

16th International Symposium on Nuclear Quadrupole Interactions.

Hiroshima, Japão.

Período: de 06 a 17 de setembro de 2001.

Hercílio Rodolfo Rechenberg

Joint European Magnetic Symposia - JEMS'01.

Grenoble, França.

Período: de 28 de agosto a 1º de setembro de 2001.

International Conference on the Applications of the Mössbauer Effect - ICAME'2001.

Oxford, Reino Unido.

Período: de 02 a 07 de setembro de 2001.

José Roberto Leite

10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics.

Guarujá, SP.

Período: de 22 a 27 de abril de 2001.

4th International Conference on Nitride Semiconductors - ICNS-4.

Denver, CO, EUA.

Período: de 16 a 20 de julho de 2001.

10th International Conference on Modulated Semiconductor Structures - MSS-10.

Linz, Áustria.

Período: de 23 a 27 de julho de 2001.

International Workshop on Physics of Light Matter Coupling in Nitrides - PLMCN-1.

Roma, Itália.

Período: de 21 de setembro a 01 de outubro de 2001.

Encontro Anual da Federação Latinoamericana das Sociedades de Física - FeLaSoFi.

Morélia, México.

Período: de 10 a 17 de outubro de 2001.

International Ibero American School on Epitaxial Growth of Semiconductor Nanostructures - EICENS'1.

Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP.

Período: de 19 a 23 de novembro de 2001.

Lucy Vitória Credídio Assali

21st International Conference on Defects in Semiconductors.

Giessen, Alemanha.

Período: de 16 a 20 de julho de 2001.

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics.

Guarujá, SP.

Período: de 22 a 27 de abril de 2001.

4th International Conference on Nitride Semiconductors - ICNS-4.

Denver, CO, EUA.

Período: de 16 a 20 de julho de 2001.

10th International Conference on Modulated Semiconductor Structures - MSS-10.

Linz, Áustria.

Período: de 23 a 27 de julho de 2001.

International Workshop on Physics of Light Matter Coupling in Nitrides - PLMCN-1.

Palestrante Convidada.

Roma, Itália.

Período: de 21 de setembro a 01 de outubro de 2001.

International Ibero American School on Epitaxial Growth of Semiconductor Nanostructures - EICENS'1.

Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP.

Período: de 19 a 23 de novembro de 2001.

2nd Ibero American Workshop on Nanostructures for Application in Micro and Optoelectronics - NANO 2001.

São José dos Campos, SP.

Período: de 26 a 30 de novembro de 2001.

Nei Fernandes de Oliveira Junior

4th Edoardo Amaldi Conference on Gravitational Waves, na University of Western Austrlia.

Perth, Austrália.

Período: de 05 a 15 de julho de 2001.

Renato de Figueiredo Jardim

8th Joint MMM-Intermag Conference.

San Antonio, Texas, EUA.

Período: de 04 a 12 de janeiro de 2001.

46th Annual Conference n Magnetism & Magnetic Materials.

Seattle, EUA.

Período: de 09 a 18 de novembro de 2001.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

14th Conference-Workshop Horizons in Hydrogen Bond Research.

Torino, na Itália.

Período: de 01 a 09 de setembro de 2001.

4f - Participação em Reuniões Científicas Nacionais:

Adalberto Fazzio

XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

São Lourenço, MG.

Período: de 15 a 19 de maio de 2001.

André Bohomoletz Henriques

XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

São Lourenço, MG.

Período: de 15 a 19 de maio de 2001.

Antônio Domingues dos Santos

XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

São Lourenço, MG.

Período: de 15 a 19 de maio de 2001.

Escola Brasileira de Magnetismo - JAS EBM'01.
Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
Porto Alegre, RS.
Período: de 16 a 25 de outubro de 2001.

Carmen Silvia de Moya Partiti

XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
São Lourenço, MG.
Período: de 15 a 19 de maio de 2001.

XII Encontro Jacques Danon de Espectroscopia Mössbauer.
Ouro Preto, MG.
Período: de 11 a 15 de novembro de 2001.

Ewout Ter Haar

XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
São Lourenço, MG.
Período: de 15 a 19 de maio de 2001.

Frank Patrick Missell

XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
São Lourenço, MG.
Período: de 15 a 17 de maio de 2001.

Gerardo Fabián Goya

XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
São Lourenço, MG.
Período: de 15 a 18 de maio de 2001.

XII Encontro Jacques Danon de Espectroscopia Mössbauer.
Ouro Preto, MG.
Período: de 12 a 14 de novembro de 2001.

Hercílio Rodolfo Rechenberg

XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
São Lourenço, MG.
Período: de 15 a 18 de maio de 2001.

XII Encontro Jacques Danon de Espectroscopia Mössbauer.
Ouro Preto, MG.
Período: de 11 a 15 de novembro de 2001.

José Roberto Leite

XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
São Lourenço, MG.
Período: de 15 a 19 de maio de 2001.

XI Semana da Física.
Campo Grande, MS.
Período: de 05 a 06 de setembro de 2001.

Conferência Nacional de Ciência, Tecnologia e Inovação no Ministério da Ciência e Tecnologia.

Ministério da Ciência e Tecnologia, Brasília, DF.

Período: de 19 a 21 de setembro de 2001.

XIX Encontro de Físicos do Norte e Nordeste.

Natal, RN.

Período: de 29 de outubro a 01 de novembro de 2001.

VI Semana da Física da Universidade Estadual de Londrina.

Londrina, PR.

Período: de 12 a 14 de novembro de 2001.

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

São Lourenço, MG.

Período: de 15 a 19 de maio de 2001.

Simpósio Workshop de Baixas Temperaturas.

Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ

Data: 25 de maio de 2001

Simpósio em comemoração aos 25 anos de Pós-Graduação da Universidade Federal de Pernambuco.

Recife, PE.

Período: de 25 a 27 de outubro de 2001.

Renato de Figueiredo Jardim

XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

São Lourenço, MG.

Período: de 15 a 19 de maio de 2001.

V Escola Brasileira de Supercondutividade.

Recife, PE.

Período: de 09 a 14 de dezembro de 2001.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

São Lourenço, MG.

Período: 15 a 19 de maio de 2001.

XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica.

Caxambu, MG.

Período: de 18 a 21 de novembro de 2001.

Valdir Bindilatti

XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

São Lourenço, MG.

Período: de 15 a 19 de maio de 2001.

5 - PRODUÇÃO CIENTÍFICA

5a - Trabalhos Apresentados em Eventos Internacionais:

1. BAIERLE, R.J.; FAGAN, S.B.; MOTA, R.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Effects of Silicon Doping on the Electronic and Structural Properties of Carbon Nanotubes". In: *School on Computational Physics - ICCMP*, Brasília, DF, Brasil (agosto de 2001).
2. BAIERLE, R.J.; FAGAN, S.B.; MOTA, R.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Effects of Silicon Doping on the Electronic and Structural Properties of Carbon Nanotubes". In: *10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Guarujá, SP, Brasil (abril de 2001).
3. BARBOSA, K.O.; MACHADO, W.V.M. and ASSALI, L.V.C. - "First-Principles Studies of Ti Impurities in SiC". In: *21st International Conference on Defects in Semiconductors*, Giessen, Alemanha (julho de 2001).
4. CANUTO, S. - "Hydrogen Bonding in Small Molecular Clusters". In: *14th Conference-Workshop Horizons in Hydrogen Bond Research*, Torino, Itália (setembro de 2001).
5. CANUTO, S. - "Monte Carlo/Quantum Mechanics Studies of Hydrogen Bonds in Liquids". In: *14th Conference-Workshop Horizons in Hydrogen Bond Research*, Torino, Itália (setembro de 2001).
6. CHU, Z.; YELON, W.B.; MURAKAMI, R.K.; SILVA, P.S.M. da; VILLAS-BOAS, V. and MISSELL, F.P. - "A neutron diffraction study of the deuterium site occupancy in Nd₅Fe₁₇D_{15.5}". In: *8th Joint MMM-Intermag Conference*, San Antonio, Texas, EUA (janeiro de 2001).
7. DALPIAN, G.M.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Surface Degrees of Freedom on the Si(100) Surface". In: *3rd Brazilian-German Workshop on Applied Surface Science*, Florianópolis, SC, Brasil (março de 2001).
8. DALPIAN, G.M.; VENEZUELA, P.; FAZZIO, A. and SILVA, A.J.R. da - "Theoretical Study of the Adsorption of Ge Atoms at Single-Height Si(100) Steps". In: *10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Guarujá, SP, Brasil (abril de 2001).
9. FAGAN, S.B.; MOTA, R.; BAIERLE, R.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Ab Initio Study of Transition-Metals on Carbon Nanotubes". In: *4th Brazilian Meeting and 33rd IUVISTA Workshop on Diamond, Diamond-Like, Nanotubes, Nitrides & Silicon Carbide*, Campos do Jordão, SP, Brasil (novembro de 2001).
10. FAZZIO, A.; SILVA, A.J.R. da; BAIERLE, R.J.; FAGAN, S.B. and MOTA, R.. - "Effects of Silicon Doping on the Electronic and Structural Properties of Carbon Nanotubes". In: *2001 MRS Spring Meeting*, San Francisco, Califórnia, EUA (abril de 2001).

11. FERRAZ, A.C. and MIOTTO, R. - "Zn-Induced Features at the GaAs(110) Surface: A First-Principles Study". In: *2nd International Seminar on Semiconductor Surface Passivation*, Ustron, Polônia (setembro de 2001).
12. GOYA, F.G. - "Magnetic and Transport Properties of Mechanosynthesized FeCr₂S₄ Sulfospinel". In: *International Symposium on Metastable, Mechanically Alloyed and Nanocrystalline Materials - ISMANAM'2001*, Ann Arbor, MI, USA (junho de 2001).
13. GOYA, G.F. and RECHENBERG, H.R. - "On the magnetic Properties of Mechanosynthesized and Ball-Milled Spinels". In: *1st Workshop on Metastable and Nanostructured Materials*, Águas de São Pedro, SP, Brasil (agosto de 2001).
14. GOYA, G.F.; RECHENBERG, H.R. and IBARRA, M.R. - "Spin Dynamics of Nanostructured La_{2/3}Ca_{1/3}MnO₃". In: *International Symposium on Metastable, Mechanically Alloyed and Nanocrystalline Materials - ISMANAM'2001*, Ann Arbor, MI, USA (junho de 2001).
15. GOYA, G.F.; SOUZA, J.A. and JARDIM, R.F. - "Mössbauer Spectroscopy and Magnetoresistivity of ⁵⁷Fe Substituted Mn in La_{0.7-x}Y_xCa_{0.3}MnO₃ Manganites". In: *46th Annual Conference on Magnetism & Magnetic Materials*, Seattle, Washington, USA (novembro de 2001).
16. HANAMOTO, L.K.; HENRIQUES, A.B.; TRIBUZY, C.V.; SOUZA, P.L. and YAVICH, B. - "Interfacial layers and impurity segregation in InP/In_{0.53}Ga_{0.47}As superlattices". In: *10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Guarujá, SP, Brasil (abril de 2001).
17. IMBERNON, R.A.L.; BLOT, A. and PARTITI, C.S.M. - "Gênese dos Minerais do Grupo Alunita-Jarosita nas Ocorrências de Canoas (PR) e Irecê (BA) - uma Armadilha para o Chumbo". In: *6^o Congresso Internacional de Geoquímica dos Países de Língua Portuguesa*, Faro, Portugal (2001).
18. JONEN, S.; RECHENBERG, H.R. and CAMPO, J. - "Rare earth effects on the magnetic behavior of R₆Fe_{11-x}Al_{3+x} compounds". In: *Joint European Magnetic Symposia - JEMS'2001*, Grenoble, França (agosto-setembro de 2001).
19. JUSTO, J.F. and ASSALI, L.V.C. - "Electrically Active Centers in Partial Dislocations in Semiconductors". In: *21st International Conference on Defects in Semiconductors*, Giessen, Alemanha (julho de 2001).
20. JUSTO, J.F. and ASSALI, L.V.C. - "Electrically Active Defects in the Core of Dislocations in Semiconductors: A Theoretical Investigation". In: *10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Guarujá, SP, Brasil (abril de 2001).
21. JUSTO, J.F.; ANTONELLI, A. and FAZZIO, A. - "The Role of Core Reconstruction Energy on Dislocation Mobility in Semiconductors". In: *10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Guarujá, SP, Brasil (abril de 2001).
22. LEITE ALVES, H.W.; ALVES, J.L.A.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Planar force-constant method for lattice dynamics of cubic III-nitrides". In: *10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Guarujá, SP, Brasil (abril de 2001).
23. LEITE, J.R.; RODRIGUES S.C.P.; SCOLFARO, L.M.R. and SIPAHI, G.M. - "Inter and Intraband transitions in cubic nitride quantum wells". In: *International*

- Workshop on Physics of Light-Matter Coupling in Nitrides - PLMCN-1*, Roma, Itália (setembro- outubro de 2001).
24. MARQUES, M.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Theoretical modeling of thermodynamic properties in disordered AlInGaN quaternary alloys". In: *2nd Ibero American Workshop on Nanostructures for Application in Micro and Optoelectronics*, São José dos Campos, SP, Brasil (novembro de 2001).
 25. MIOTTO, R. and FERRAZ, A.C. - "Study of the Adsorption of PH₃ on Ge(001) and Si(001) Surfaces". In: *10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Guarujá, SP, Brasil (abril de 2001).
 26. MIOTTO, R.; FERRAZ, A.C. and SRIVASTAVA, G.P. - "Comparative Study of the Adsorption of C₂H₄ on the Si(001) and Ge(001) Surfaces". In: *20th European Conference on Surface Science*, Krakow, Polônia (setembro de 2001).
 27. MOTA, F.B.; JUSTO, J.F. and FAZZIO, A. - "Defect Centers in Amorphous Silicon Nitride: Electronic and Structural Properties". In: *10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Guarujá, SP, Brasil (abril de 2001).
 28. ORELLANA, W.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "First Principles Calculations of O₂ Diffusion in SiO₂". In: *10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Guarujá, SP, Brasil (abril de 2001).
 29. ORELLANA, W.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "First Principles Calculations of O₂ Diffusion in SiO₂". In: *2001 March Meeting of the APS*, Seattle, WA, EUA (março de 2001).
 30. ORELLANA, W.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "O₂ Diffusion in SiO₂: Triplet versus Singlet". In: *School on Computational Physics - ICCMP*, Brasília, DF, Brasil (agosto de 2001).
 31. ORMEÑO, P.G.G.; PETRILLI, H.M. and SCHÖN, C.G. - "Phase Diagrams of FeAl Using Ab Initio Electronic Structure Calculations". In: *Conference on Applied Density Functional Theory*, Viena, Áustria (janeiro de 2001).
 32. PAIVA, R. de; OLIVEIRA C. de; NOGUEIRA R.A.; ALVES, J.L.A.; LEITE ALVES, H.W.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Theoretical study of the AlGaIn CdZnTe alloys". In: *10th Brazilian Workshop on Semiconductor and Physics*, Guarujá, SP, Brasil (abril de 2001).
 33. PARTITI, C.S.M.; IMBERNON, R.A.L.; FRANCO, D.R.; BERQUÓ, T.S. and BEVILACQUA, J.E. - "Magnetic characterization of sediments of urban supply lakes from São Paulo, Brazil". In: *International Conference on the Applications of the Mössbauer Effect - ICAME'2001*, Oxford, Reino Unido (setembro de 2001).
 34. PERIPOLLI, S.B.; MOTA, R.; SILVA, C.R.S. da and FAZZIO, A. - "The Role Played by Vacancies in the Silicon Crystal-Amorphous Transition. In: *IV Brazilian Meeting and 33rd IUVISTA Workshop on Diamond, Diamond-Like, Nanotubes, Nitrides & Silicon Carbide*, Campos dos Jordão, SP, Brasil (novembro de 2001).

35. PETRILLI, H.M. - "Hyperfine Interactions: Contributions from Ab-Initio Calculations". In: *XXXVI Zakopane School of Physics - International Symposium on Condensed Matter Studies by Nuclear Methods*, Zakopane, Polônia (maio de 2001).
36. RECHENBERG, H.R.; BRANDI, S.D. and PADILHA, A.F. - "Mössbauer study of the α' phase formation in Fe-Cr-based duplex stainless steel". In: *International Conference on the Applications of the Mössbauer Effect - ICAME'2001*, Oxford, Reino Unido (setembro de 2001).
37. REIS, S.T.; FARIA, D.L.A.; MARTINELLI, J.R.; PONTUSCHKA, W.M.; DAY, D.E. and PARTITI, C.S.M. - "Structural features of lead iron phosphate glasses". In: *First International Symposium on Non-Crystalline Solids in Brazil*, Foz do Iguaçu, Brasil (2001).
38. RODRIGUES, S.C.P.; SIPAHI, G.M.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Electronic properties of GaAs_{1-x}N_x multiple quantum wells". In: *2nd Ibero American Workshop on Nanostructures for Application in Micro and Optoelectronics*, São José dos Campos, SP, Brasil (novembro de 2001).
39. RODRIGUES, S.C.P.; SIPAHI, G.M.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; FREY, T.; AS, D.J.; SCHIKORA, D. and LISCHKA, K. - "Inter and intraband transitions in cubic nitrides quantum wells". In: *International Workshop on Physics of Light-Matter Coupling in Nitrides - PLMCN-1*, Roma, Itália (setembro a outubro de 2001).
40. SCOLFARO, L.M.R. - "Phase Separation in Group-III Nitride alloys". In: *International Workshop on Physics of Light-Matter Coupling in Nitrides - PLMCN-1*, Roma, Itália (setembro a outubro de 2001).
41. SCOLFARO, L.M.R.; RODRIGUES, S.C.P.; LEITE, J.R.; SIPAHI, G.M.; FREY, T.; AS, D.J.; SCHIKORA, D. and LISCHKA, K. - "Influence of p-doping in nitride-derived heterostructures". In: *The Fourth International Conference on Nitride Semiconductors - ICNS-4*, Denver, U.S.A. (julho de 2001).
42. SCOLFARO, L.M.R.; TELES, L.K.; LEITE, J.R.; FURTHMÜLLER, J. and BECHSTEDT, F. - "Phase separation and gap bowing in zinc-blende InGaN, InAlN, B_{0.5}GaN and BAIN alloy layers". In: *10th International Conference on Modulated Semiconductor Structures - MSS-10*, em Linz, Austria (julho de 2001).
43. SILVA, A.J.R.da; DALPIAN, G.M.; JANOTTI, A. and FAZZIO, A. - "Theoretical Studies of Small Ge Structures on Si(100)". In: *2001 March Meeting of the APS*, Seattle, WA, EUA (março de 2001).
44. SILVA, E.Z. da; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Breaking of Gold Nanowires: A Computer Simulation Study". In: *XI Workshop on Computational Material Science 2001*, Sardenha, Itália (setembro de 2001).
45. SILVEIRA, M.G.; FAZZIO, A.; KINTOP, J.A. and SILVA, A.J.R. da - "Monte Carlo Simulation of Si(100) and Amorphous Silicon Interfaces". In: *School on Computational Physics - ICCMP*, Brasília, DF, Brasil (agosto de 2001).
46. SILVEIRA, M.G.; FAZZIO, A.; KINTOP, J.A.; PAIVA, G. and SILVA, A.J.R. da - "Theoretical Study of Si Nanostructures Deposited on the Si(100)". In: *10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Guarujá, SP, Brasil (abril de 2001).

47. SIPAHI, G.M.; RODRIGUES, S.C.P.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Inter and intraband transitions in cubic nitride quantum wells". In: *10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Guarujá, SP, Brasil (abril de 2001).
48. SIPAHI, G.M.; RODRIGUES, S.C.P.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Calculated luminescence spectra of GaAs/GaAs_{1-x}N_x derived heterostructures". In: *2nd Ibero American Workshop on Nanostructures for Application in Micro and Optoelectronics*, São José dos Campos, SP, Brasil (novembro de 2001).
49. SOUZA, J.A.; JARDIM, R.F.; MUCCILLO, R.; MUCCILLO, E.N.S.; TORIKACHVILI, M.S. and NEUMEIER, J.J. - "Impedance Spectroscopy Evidence of the Phase Separation in La_{0.3}Pr_{0.4}Ca_{0.3}MnO₃ Manganite". In: *8th MMM-Intermag Conference*, San Antonio, TX, USA (janeiro de 2001).
50. SOUZA, P.L.; TRIBUZY, C.V.; LAUDI, S.M.; PIRES, M.P.; BUTENDEICH, R.; YAVICH, B.; HENRIQUES, A.B.; BITTENCOURT, A.C. and MARQUES, G.E. - "Delta-doping superlattices in multiple quantum wells". In: *Advanced Research Workshop in Semiconductor Nanostructures*, Queenstown, New Zealand (fevereiro de 2001).
51. TELES, L.K.; FURTHMÜLLER, J.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R. and BECHSTEDT, F. - : "Structural and thermodynamic properties of B_xGa_{1-x}N and B_xAl_{1-x}N alloys". In: *2nd Ibero American Workshop on Nanostructures for Application in Micro and Optoelectronics*, São José dos Campos, SP, Brasil (novembro de 2001).
52. VENEZUELA, P.; DALPIAN, G.M.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "A Systematical Study of the SiGe Alloy and its Intrinsic Defects". In: *2001 March Meeting of the APS*, Seattle, WA, EUA (março de 2001).
53. VENEZUELA, P.; DALPIAN, G.M.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "A Systematical Study of the SiGe Alloy and its Intrinsic Defects". In: *2001 MRS Spring Meeting*, San Francisco, Califórnia, EUA (abril de 2001).
54. VENEZUELA, P.; DALPIAN, G.M.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "A Systematical Study of the SiGe Alloy and its Intrinsic Defects". In: *10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Guarujá, SP, Brasil (abril de 2001).
55. VENEZUELA, P.; DALPIAN, G.M.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Vacancy Related Defects in Si_xGe_{1-x} Alloy". In: *School on Computational Physics - ICCMP*, Brasília, DF, Brasil (agosto de 2001).
56. VIVAS, P.G.; CARVALHO, L.C. de; SILVA, E.E. da; LEITE ALVES, H.W.; ALVES, J.L.A.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Adsorption of Si and C atoms over SiC (111) surfaces". In: *10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Guarujá, SP, Brasil (abril de 2001).
57. ZANELLA, I.; PIQUINI, P.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Investigation of the Interaction of O₂ with Semiconductor Carbon Nanotubes". In: *School on Computational Physics - ICCMP*, Brasília, DF, Brasil (agosto de 2001).

58. ZHAO, S.; ASSALI, L.V.C.; JUSTO, J.F.; GILMER, G.H. and KIMERLING, L.C. - "Structure and Bonding of Iron-Acceptor Pairs in Silicon". In: *10th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Guarujá, SP, Brasil (abril de 2001).

5b - Trabalhos Apresentados em Eventos Nacionais:

1. ALMEIDA, C.M.V.B.; GIANETTI, B.F.; JORGE, F.O. and PARTITI, C.S.M. - "Caracterização por espectroscopia Mössbauer e eletroquímica de alteração pseudomórfica de Pirita". In: *Simpósio Brasileiro de Eletroquímica e Eletroanalítica - SIBEE*, de 22 a 26 de abril de 2001, Gramado, RS. Livro de resumos (2001).
2. BERQUÓ, T.S. e PARTITI, C.S.M. - "Caracterização magnética de Turfas: um estudo de magnetismo ambiental". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 157 (2001).
3. BERQUÓ, T.S. e PARTITI, C.S.M. - "Estudo de magnetismo ambiental em Turfas do Estado de São Paulo". In: *XII Encontro Nacional de Espectroscopia Mössbauer 'Jacques Danon'*, Ouro Preto, MG, de 11 a 14 de novembro de 2001. Livro de resumos, pág. 50 (2001).
4. BINDILATTI, V.; GRATENS, X; TER HAAR, E.; PADUAN FILHO, A.; OLIVEIRA Jr., N.F.; MONTENEGRO, F.C. e SHAPIRA, Y. - "Measurement of the dominant exchange Constant in the diluted antiferromagnetic $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ ". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 192 (2001).
5. BRINATTI, A.M.; MASCARENHAS, Y.P.; MACEDO, A.; PARTITI, C.S.M. e PEREIRA, V.P. - "Quantificação dos minerais presentes em um horizonte por DRX utilizando o método de Rietveld". In: *XXVIII Congresso Brasileiro de Ciência do Solo*, Londrina, Pr, de 01 a 06 de julho de 2001. Livro de resumos, pág. 37 (2001).
6. CAVALHEIRO, A.; TAKAHASHI, E.K.; SILVA, E.C.F. da; QUIVY, A.A.; LEITE, J.R. e MENESES, E.A. - "The effect of illumination on the electronic structure of Si δ -Doped $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum well". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 336 (2001).
7. COAQUIRA, J.A.H.; RECHENBERG, H.R.; CARBONARI, A. e MESTNIK FILHO, J. - "Estudo magnético e hiperfino do pseudobinário $\text{Ce}(\text{Fe}_{0.93}\text{Co}_{0.07})_2$ ". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 191 (2001).
8. COUTINHO, K. e CANUTO, S. - "Hybrid Sequential Monte Carlo-Quantum Mechanics Studies: Analysis of Conformational and Electronic Changes of Molecules in Solution". In: *XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica*, Caxambu, MG, de 18 a 21 de novembro de 2001. Livro de resumo (2001).

9. DANTAS, N.O.; QU, FANYAO; LEITE, J.R. e SILVA, E.C.F. da - "The optical property of delta-doped single heterojunctions: growth direction effects". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 337 (2001).
10. ESCOTE, M.T. e JARDIM, R.F. - "Magnetic and Transport Properties of $Nd_{1-x}R_xNiO_3$ (R = Sm, Eu) Compounds". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 304 (2001).
11. ESCOTE, M.T.; JARDIM, R.F.; BEM-DOR, L. e LACERDA, A.H. - "Upper Critical Field of the Ferromagnetic Superconductor $Gd_{1.4}Ce_{0.6}RuSr_2O_{10}$ ". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 385 (2001).
12. FAGAN, S.B.; MOTA, R.; BAIERLE, R.J.; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - "Effects of Silicon Doping on the Electronic and Structural Properties of Carbon Nanotubes". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 328 (2001).
13. FILETI, E.; FILETI, T.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - "Determinação da Primeira Hiperpolarizabilidade da Molécula de Piridina em Água". In: *XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica*, Caxambu, MG, de 18 a 21 de novembro de 2001. Livro de resumo (2001).
14. FILETI, T.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - "Estudo Comparativo entre Aglomerados e Líquidos. Aplicação para Piridina e Água". In: *XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica*, Caxambu, MG, de 18 a 21 de novembro de 2001. Livro de resumo (2001).
15. FRANCO, D.R.; IMBERNON, R.A.; BERQUÓ, T.S.; ENZWEILER, J. e PARTITI, C.S.M. - "Estudo por ajustes de distribuição de amostras de sedimentos provenientes da barragem de Taiacupeba, São Paulo". In: *XII Encontro Nacional de Espectroscopia Mössbauer 'Jacques Danon'*, Ouro Preto, MG, de 11 a 14 de novembro de 2001. Livro de resumos, pág. 17 (2001).
16. FRANCO, D.R.; IMBERNON, R.A.L. e PARTITI, C.S.M. - "Análises de amostras de sedimentos de represas: um estudo de magnetismo ambiental por espectroscopia Mössbauer". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 157 (2001).
17. GEORG, H.C. e COUTINHO, K. - "Estudo de Propriedades Estruturais e Eletrônicas da α -Ciclodextrina". In: *XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica*, Caxambu, MG, de 18 a 21 de novembro de 2001. Livro de resumo (2001).
18. GOYA, G.F.; MEMO, A. and HAEUSELER, H. - "Novas fases do sistema $(1-x)FeIn_2S_{4-x}FeIn_2Se_4$: caracterização magnética e Mössbauer". In: *Encontro Nacional de Espectroscopia Mössbauer 'Jacques Danon'*, Ouro Preto, MG, de 11 a 14 de novembro (2001).

19. GRATENS, X.; BINDILATTI, V.; TER HAAR, E.; OLIVEIRA Jr., N.F.; SHAPIRA, Y. e MONTENEGRO, F.C. - "Magnetization steps in $Mn_{0,084}Zn_{0,916}F_2$: exchange constant and Mn distribution". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág 192 (2001).
20. GRATENS, X.; BINDILATTI, V.; TER HAAR, E.; OLIVEIRA Jr., N.F.; SHAPIRA, Y. e GOLACKI., Z. - "Magnetization steps in $Pb_xCe_{1-x}Te$. At 20~mk". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 192 (2001).
21. JESUS, D.R. e PARTITI, C.S.M. - "Caracterização magnética e estrutural das ligas $Fe_{78-x}Al_xSi_9B_{13}$ produzidas por Ball-milling". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 158 (2001).
22. JESUS, D.R. e PARTITI, C.S.M. - "Espectroscopia Mössbauer de ligas $Al_xFe_{78-x}Si_9B_{13}$ produzidas por mecanossíntese". In: *XII Encontro Nacional de Espectroscopia Mössbauer 'Jacques Danon'*, Ouro Preto, MG, de 11 a 14 de novembro de 2001. Livro de resumos, pág. 18 (2001).
23. LANCAROTTE, M.S.; SANTI, C.E.; NÓBREGA, L.N.; SOUCHE, Y. e SANTOS, A.D. - "Desenvolvimento de um microscópio óptico de varredura em campo próximo". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 427 (2001).
24. LEITE ALVES, H.W.; ALVES, J.L.A.; SCOLFARO, L.M.R. e LEITE, J.R. - "Dynamical Properties of III-Nitrides". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 328 (2001).
25. LEITE, J.R.; TABATA, A.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; RODRIGUES, S.C.P.; SILVEIRA, E.; MENESES, E.A.; RIBEIRO, E.; AS, D.J. e LISCHKA, K. - "Light emission process in GaN/InGaN/GaN quantum wells". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 345 (2001).
26. LUDWIG, V.; CANUTO, S.; BORIN, A.C.; SERRANO-ANDRÉS, L. e ROTH, W. - "The Lowest Electronic States of 1H- and 2H-Benzotrizole". In: *XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica*, Caxambu, MG, de 18 a 21 de novembro de 2001. Livro de resumo (2001).
27. MARQUES, M. e SCOLFARO, L.M.R. - "Estabilidade de aceitadores em AlN e GaN cúbicos". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 348 (2001).
28. MARTINS, A.; FANTINI, M.C.A. e SANTOS, A.D. - "Estudo estrutural e magnético de filmes finos FePt como uma função da temperatura de deposição". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG,

- de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 168 (2001).
29. MENDES, I.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - “Utilizando Monte Carlo para Estudar Mudanças Conformacionais de Sistemas Moleculares”. In: *XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica*, Caxambu, MG, de 18 a 21 de novembro de 2001. Livro de resumo (2001).
 30. MESA, V.A. e JARDIM, R.F. - “Produção e Caracterização de Compostos $\text{PrBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ Compounds”. In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 273 (2001).
 31. MESA, V.A.; JARDIM, R.F.; GRATENS, X. e BEM-DOR, L. - “Absence of Superconductivity in $\text{PrBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ Compounds”. In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 362 (2001).
 32. MIYAKAWA, W.; NERI, J.W.; SANTOS, A.D. e RODRIGUES, N.A.S. - “Fabrication of microlenses on the end of a fiber using CO_2 laser”. In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 459 (2001).
 33. MURAKAMI, R.K.; VILLAS-BOAS, V.; McCALLUM, R.W.; DENNIS, K.W. e KRAMER, M.J. - “Magnetic and structural properties of improved nanocrystalline PrFeB -based alloys”. In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 187 (2001).
 34. NOGUEIRA, R.N. e PETRILLI, H.M. - “Influência da Primeira Vizinhança nos Campos Hiperfinos de Grãos de Co em Cu e Ag”. In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 189 (2001).
 35. NORIEGA, O.C.; TABATA, A.; CHITTA, V.A.; SOTOMAYOR, N.M.; FERNANDEZ, J.R.L. e LEITE, J.R. - “Photorefectance Measurements on Cubic GaN and GaN/InGaN Quantum Wells”. In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 321 (2001).
 36. OLIVEIRA, C. de; NOGUEIRA, R.A.; ALVES, J.L.A. e LEITE, J.R. - “Estudo Teórico de Nanoestruturas de Compostos III-Nitretos”. In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 325 (2001).
 37. PAIVA, R. de; NOGUEIRA, R.A.; OLIVEIRA, C. de; ALVES, J.L.A.; ALVES, H.W.L.; LEITE, J.R. e SCOLFARO, L.M.R. - “Estudo Teórico das Ligas $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{N}$ e $\text{Al}_{1-x}\text{B}_x\text{N}$ ”. In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 323 (2001).

38. PARTITI, C.S.M.; IMBERNON, R.A.; FRANCO, D.R. e BERQUÓ, T.S. - “Espectroscopia Mössbauer de óxidos e hidróxidos de ferro: Caracterização ao estudo do magnetismo ambiental”. In: *XII Encontro Nacional de Espectroscopia Mössbauer ‘Jacques Danon’*, Ouro Preto, MG, de 11 a 14 de novembro de 2001. Livro de resumos, pág. 13 (2001).
39. PENDL JR., W.; COAQUIRA, J.A.H. e RECHENBERG, H.R. - “Origem do magnetismo em compostos de terras raras RCO_3Sn ”. In: *Encontro Nacional de Espectroscopia Mössbauer ‘Jacques Danon’*, Ouro Preto, MG, de 11 a 14 de novembro de 2001. Livro de resumos, pág. 27 (2001).
40. QU, F.; DANTAS, N.O.; LEITE, J.R. e SILVA, E.C.F. da - “Investigation of h-band emission in single heterojunctions: doping role of Si atoms”. In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 335 (2001).
41. QUINTÃO, A.D. e CANUTO, S. - “Estudo Teórico da Molécula de Azul de Metileno em Meio Solvente: Propriedades Estruturais e Espectroscópicas, Formação de Agregados e Interações de Hidrogênio”. In: *XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica*, Caxambu, MG, de 18 a 21 de novembro de 2001. Livro de resumo (2001).
42. RISSI, E.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - “Efeito de Solvente na Espectroscopia de Absorção da Uréia em Água e Comparação Cluster Versus Líquido para Energia de Ligação”. In: *XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica*, Caxambu, MG, de 18 a 21 de novembro de 2001. Livro de resumo (2001).
43. SANTOS, A.M.; SILVA, E.C.F. da; LEITE, J.R. e LEITE ALVES, H.W. - “Cálculo do Espectro de Fônons dos Nitretos BN, AlN, GaN e InN”. In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 324 (2001).
44. SILVA, C.R.S. da; FAZZIO, A. e SILVA, A.J.R. da - “Dinâmica Molecular de Primeiros Princípios da Transição de Fase Zinblend - $\beta\text{-Sn}$ na Liga Ordenada $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ ”. In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 312 (2001).
45. SILVEIRA, E.; RIBEIRO, E.; MENESES, E.A.; TABATA, A.; NORIEGA, O.C.; LEITE, J.R.; FREY, T.; AS, D.J. e LISCHKA, K. - “Espectroscopia Raman em poços quânticos de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ”. In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 347 (2001).
46. SOUZA, J.A.; JARDIM, R.F.; MUCCILLO, R.; MUCCILLO, E.N.S.; TORIKACHVILI, M.S. e NEUMEIER, J.J. - “Impedance Spectroscopy Evidence of the Phase Separation in $\text{La}_{0.3}\text{Pr}_{0.4}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ Manganite”. In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 184 (2001).
47. TABATA, A.; NORIEGA, O.C. e LEITE, J.R. - “Raman Scattering Studies of the Vibrational Properties in non Intentionally Doped Cubic $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ Layers”. In: *XXIV Encontro de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 15 a 19 In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG,

- de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 322 (2001).
48. TABATA, A.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; FREY, T.; KRARCHENKO, A.; AS, D.J.; SCHIKORA, D.; LISCHKA, K. e BECHSTEDT, F. - "Reduction or suppression of spinodal phase separation in cubic $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alloys: The role of the biaxial strain". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 327 (2001).
 49. TER HAAR, E.; MORLOTTI, M.S.; GRATENS, X.; BINDILATTI, V. e OLIVEIRA Jr., N.F. - "A vibrating wire viscometer for thermometry at high fields and low temperatures". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 196 (2001).
 50. TRZESNIAK, D.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - "A Study of the Intense Electronic Absorption Transition of the β -Carotene Molecule in Solvents". In: *XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica*, Caxambu, MG, 18 a 21 de novembro de 2001. Livro de resumo (2001).
 51. TUFALILE, A.P.B.; SOUCHE, Y. e SANTOS, A.D. - "Técnica de modulação de fase para medidas de TMOKE". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 193 (2001).
 52. VENEZUELA, P.; DALPIAN, G.; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - "Estudo Sistemático da Liga SiGe e seus Defeitos Intrínsecos". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 329 (2001).
 53. ZEVALLOS MARQUEZ, A.M.O.de; NORIEGA, O.C.; LEITE, J.R., TABATA, A., MENESES, E.; AS, D.J.; SCHIKORA, D. e LISCHKA, K. - "Photoluminescence of cubic GaN GaAs (100) grown by RF-MBE". In: *XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, MG, de 07 a 11 de maio de 2001. Livro de resumos, Sociedade Brasileira de Física, pág. 325 (2001).

5c - Trabalhos Publicados em Periódicos de divulgação Internacional e com Árbitro:

1. AGUIAR, J. A.; LIMA, C.L.S.; YADAVA, Y.P.; JARDIM, R.F.; MONTARROYOS, E. and FERREIRA, J. M. - "Structural and magnetic properties of NiS doped Bi-2212 superconductors", *Physica C* **363**, 354 (2001).
2. ALMEIDA, K.J. de; COUTINHO, K.; ALMEIDA, W.B. de; ROCHA, W.R. and CANUTO, S. - "A Monte Carlo-Quantum Mechanical Study of the Solvatochromism of Pyrimidine in Water and Carbon Tetrachloride", *Phys. Chem. Chem Phys.* **3**, 1583 (2001).
3. AS, D.J.; FREY, T.; BARTELS, M.; LISCHKA, K.; GOLDHAHN, R.; SHOKHOVETS, S.; TABATA, A.; FERNANDEZ, J.R.L. and LEITE J.R. - "MBE

- growth of cubic $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ heterostructures-structural, vibrational and optical properties”, *J. Cryst. Growth* **230**, 421 (2001).
4. BAIERLE, R.J.; FAGAN, S.B.; MOTA, R.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - “Electronic and Structural Properties of Silicon Doped Carbon Nanotubes”, *Phys. Rev. B* **64**, 085413 (2001).
 5. BARBOSA, K.O.; MACHADO, W.V.M. and ASSALI, L.V.C. - “First-Principles Studies of Ti Impurities in SiC”, *Physica B* **308-310**, 726 (2001).
 6. BARRA-BARRERA, A.D.; MURAKAMI, R.K.; PARTITI, C.S.M. and VILLAS-BOAS, V. - “Mössbauer study of nanocrystalline PrFeB and PrFeCrB alloys”, *J. Magn. Magn. Mat.* **226-230**, 1453-1454 (2001).
 7. BYKOV, A.A.; GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; BAKAROV, A.; KUDRAYASHEV, V.M.; TOROPOV, A.I. and NASTAUSHEV, YU.V - “Quasiclassical negative magnetoresistance of a two-dimensional electron gas in random magnetic field”, *Phys. Rev. B* **65**, 035703 (2001).
 8. BUTENDEICH, R.; TRIBUZY, C.V.B.; PAMPLONA-PIRES, M.; SOUZA, P.L. and HENRIQUES, A.B. - “Carbon delta-doped AlGaAs grow by metalorganic vapor phase epitaxy”, *Journal of Applied Physics*. Estados Unidos, **90**, 1660-1662 (2001).
 9. BYKOV, A.A.; GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; MOSHEGOV, N.T.; BARAKOV, A.K.; TOROPOV, A.I.; MAUDE, D.K. and PORTAL, J.C. - “Magnetoresistance in a stripe-shaped two dimensional electron gas”, *Physica B* **298**, 79 (2001).
 10. CAJACURI, R. A.; GRATENS, X.; TER HAAR, E.; BINDILATTI, V.; OLIVEIRA Jr., N. F.; SHAPIRA, Y. and GOLACKI, Z - “Distant-Neighbors Exchange Constants in $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ from Magnetization Steps”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. Holanda, **226**, 2022-2023 (2001).
 11. CAMPO, J.; PALACIO, F.; BECERRA, C.C.; WILDES, A.; REGNAULT, L.P. and LORENZO, J.E. - “Spin waves in the 3d $S = 5/2$ Heisenberg antiferromagnetic systems $\text{K}_2\text{Fe}_{1-x}\text{In}_x\text{Cl}_5\cdot\text{D}_2\text{O}$ ($x=0.0$ and 0.05)”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. Holanda, **226-230**, 479-81 (2001).
 12. CARVALHO, Z.V.; BECERRA, C.C.; PADUAN FILHO, A. and PALACIO, F. - “Magnetic properties of the 1D Heisenberg antiferramgneti $\text{CsMnA}_3\text{2H}_2\text{O}$ ($A=\text{Cl,Br}$) doped with Cu below the 3D ordering temperature”, *J. Mag. Mag. Mat.* **226**, 615-617 (2001).
 13. COAQUIRA, J.A.H. and RECHENBERG, H.R. - “Magnetic properties of hexagonal Laves phase $\text{Zr}(\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x})_2$ compounds”, *J. Phys.: Condens. Matter.* **13**, 8415 (2001).
 14. COAQUIRA, J.A.H. and RECHENBERG, H.R. - “Spin glass behavior of $\text{Zr}(\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x})_2$ compounds”, *J. Magn. Magn. Mater.* **226-230**, 1306 (2001).
 15. COAQUIRA, J.A.H.; RECHENBERG, H.R.; MARQUINA, C.; IBARRA, M.R.; BENITO, A.M.; MASER, W.; MUÑOZ, E. and MARTÍNEZ, M.T. - “Hyperfine and magnetic characterization of Fe particles hosted in carbon nanocapsules”, *Hyperfine Interactions* **134**, 103-108 (2001).
 16. COUTINHO, K.; SAAVEDRA, N.; SERRANO, A. and CANUTO, S. - “A Monte Carlo-Quantum Mechanics Study of the Spectroscopic Properties of Molecules in Solution”, *J. Molec. Structure (Theochem)* **539**, 171 (2001).

17. DALPIAN, G.M.; FAZZIO, A. and SILVA, A.J.R. da - "Adsorption of Monomers on Semiconductors and the Importance of the Surface Degrees of Freedom", *Phys. Rev. B* **63**, 205303 (2001).
18. DALPIAN, G.M.; FAZZIO, A. and SILVA, A.J.R. da - "Influence of Surface Degrees of Freedom on the Adsorption of Ge Ad-Atoms on Si(100)", *Computational Materials Science* **22**, 19 (2001).
19. DALPIAN, G.M.; FAZZIO, A. and SILVA, A.J.R. da - "Theoretical STM Images of Ge Monomers and Trimers on Si(100)", *Surf. Sci.* **482-485**, 507 (2001).
20. ESCOTE, M.T. and JARDIM, R.F. - "Structural and transport properties of NdNiO₃ thin films made by r. f. sputtering", *J. Mag. Mater.* **42**, 226-230 (2001).
21. FAGAN, S.B.; MOTA, R.; BAIERLE, R.J.; PAIVA, G.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Stability Investigation and Thermal Behavior of a Hypothetical Silicon Nanotube", *Journal of Molecular Structure (Theochem)* **539**, 101 (2001).
22. FAGAN, S.B.; SARTOR, D.S.; MOTA, R.; BAIERLE, R.J.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Energetics and Structural Investigation of Double-Walled Carbon and Silicon Nanotubes", *Materials Research Symposium Proceedings* **633**, A13.41.1 (2001).
23. FAZZIO, A.; BAIERLE, R.J.; FAGAN, S.B.; MOTA, R. and SILVA, A.J.R. da - "Ab Initio Study of Si Doped Carbon Nanotubes: Electronic and Structural Properties", *Materials Research Society Proceedings* **675**, W8.4.1 (2001).
24. FERNANDEZ, J.R.L.; MOYSÉS ARAÚJO, C.; FERREIRA DA SILVA, A.; LEITE, J.R.; SERNELIUS, Bo.E.; TABATA, A.; ABRAMOF, E.; CHITTA, V.A.; PERSSON, C.; AHUJA, R.; PEPE, I.; AS, D.J.; FREY, T.; SCHIKORA, D. and LISCHKA, K. - "Electrical resistivity and band-gap shift of Si-doped GaN and metal-nonmetal transition in cubic GaN, InN and AlN systems", *J. Cryst. Growth* **231**, 420 (2001).
25. FREY, T.; AS, D.J.; BARTELS, M.; PAWLIS, A.; LISCHKA, K.; TABATA, A.; FERNANDEZ, J.R.L.; SILVA, M.T.O.; LEITE, J.R.; HAUG, C. and BRENN, R. - "Structural and Vibrational Properties of MBE Grown Cubic (Al,Ga)N/GaN Heterostructures", *J. Appl. Phys.* **89**, 2631 (2001).
26. FROTA-PESSÔA, S. - "Pairs of 3d Impurities in Au: Local Moments and Exchange Coupling from First-Principles", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **226-230**, 1021 (2001).
27. FROTA-PESSÔA, S. and LEGOAS, S.B. - "Hyperfine Fields in Complex Metallic Systems: Co Clusters Embedded in Cu", *Hyperfine Interactions* **133**, 207 (2001).
28. GOYA, G.F. and SAGREDO, V. - "Spin-glass ordering in Zn_{1-x}Mn_xIn₂Te₄ magnetic semiconductor", *Phys. Rev. B* **64**, 235208 (2001).
29. GOYA, G.F.; RECHENBERG, H.R. and SAGREDO, V. - "Study of the spin glass transition in FeCr_{2x}In_{2-2x}S₄ thiospinel", *J. Magn. Mater.* **226-230**, 1298 (2001).
30. GRATENS, X.; BINDILATTI, V.; TER HAAR, E.; OLIVEIRA Jr., N.F.; SHAPIRA, Y. and MONTENEGRO, F.C. - "Magnetization steps in Mn_{0.084}Zn_{0.916}F₂:

- exchange constant and Mn distribution”, *Physical Review B, Condensed Matter and Materials Physics* **64**, n 21, 4424 (2001).
31. GRATENS, X.; TER HAAR, E.; BINDILATTI, V.; OLIVEIRA Jr., N.F.; SHAPIRA, Y. and GOLACKI, Z. - “Magnetization Steps in $Pb_{1-x}Ce_xS$ at 20 mk”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. Holanda, **226**, 2081-2082 (2001).
 32. GUILHERME, E.G. and RECHENBERG, H.R. - “Synthesis and magnetic properties of $Nd(Fe,M)_{12}$ (M=Mo and Ti) and their compounds nitrated by chemical reaction with sodium azide (NaN_3)”, *Key Engineering Materials* **189-191**, 655 (2001).
 33. GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; OLSHANETSKII, E.B.; MOSHEGOV, N.T.; TOROPOV, A.I.; MAUDE, D.K.; CASSÉ, M. and PORTAL, J.C. - “Quantum Hall Effect in a Wide Parabolic Well”, *Physica B* **298**, 306 (2001).
 34. HENRIQUES, A.B.; OLIVEIRA, R. F.; SOUZA, P.L. and YAVICH, B. - “Optical probing of Tamm states in doped superlattices in high magnetic fields”, *Physica B*. Holanda, **298**, 320-323 (2001).
 35. HENRIQUES, A.B.; SOUZA, P.L. and YAVICH, B. - “Anisotropy of the cyclotron mass in superlattices containing two populated minibands”, *Semiconductor Science and Technology*. Inglaterra, **16**, 1 (2001).
 36. HENRIQUES, A.B. - “Strong luminescence from Tamm states in modulation-doped superlattices”, *Applied Physics Letters*. Estados Unidos, **78**, 691 (2001).
 37. HENRIQUES, A.B.; SOUZA, P.L. and YAVICH, B. - “Electronic scattering in doped finite superlattices”, *Physical Review B*. Estados Unidos, **44**, 45319 (2001).
 38. HUSBERG, O.; KHARTCHENKO, A.; AS, D.J.; VOGELSANG, H.; FREY, T.; SCHIKORA, D.; LISCHKA, K.; NORIEGA, O.C.; TABATA, A. and LEITE, J.R. - “Photoluminescence from quantum dots in cubic GaN/InGaN/GaN double heterostructures”, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 1243 (2001).
 39. JESUS, D.R. and PARTITI, C.S.M. - “Mössbauer study of the phase distribution of $Fe_{78-x}Al_xSi_9B_{13}$ Powder”, *J. Magn. Magn. Mat.* **226-230**, 1555-1557 (2001).
 40. JUSTO, J.F. and ASSALI, L.V.C. - “Electrically Active Centers in Partial Dislocations in Semiconductors”, *Physica B* **308-310**, 489 (2001).
 41. JUSTO, J.F. and ASSALI, L.V.C. - “Reconstruction Defects on Partial Dislocations in Semiconductors”, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 3630 (2001).
 42. JUSTO, J.F.; ANTONELLI, A. and FAZZIO, A. - “Dislocation Core Properties in Semiconductors”, *Solid State Communications* **118**, 651 (2001).
 43. JUSTO, J.F.; ANTONELLI, A. and FAZZIO, A. - “The Energetics of Dislocation Cores in Semiconductors and their Role on Dislocation Mobility”, *Physica B* **302-303**, 398 (2001).
 44. JUSTO, J.F.; SCHMIDT, T.M., FAZZIO, A. and ANTONELLI, A. - “Segregation of Dopant Atoms on Extended Defects in Semiconductors”, *Physica B* **302-303**, 403 (2001).

45. LEITE ALVES, H.W.; ALVES, J.L.A.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Planar force-constant method for lattice dynamics of cubic InN", *MRS Proceedings* **639** (Eds. U. Nishra, M.S. Shur, C.M. Wetzel, B. Gil, and K. Kishino) (2001).
46. LEITE ALVES, H.W.; ALVES, J.L.A.; NOGUEIRA, R.A. and LEITE, J.R. - "A comparative study of the influence of the local density approximation and the generalized gradient approximation on the calculated properties of the III-nitride (110) surfaces", *MRS Proceedings* **639** (Eds. U. Nishra, M.S. Shur, C.M. Wetzel, B. Gil, and K. Kishino) (2001).
47. LOURENÇO, S.A.; DIAS, I.F.L.; DUARTE, J.L.; LAURETO, E.; IWAMOTO, H.; MENESES, E.A. and LEITE, J.R. - "Temperature Dependence of Excitonic Transitions in Al_xGa_{1-x}As/GaAs Quantum Wells", *Superlattices and Microstructures* **29**, 225 (2001).
48. LOURENÇO, S.A.; DIAS, I.F.L.; DUARTE, J.L.; LAURETO, E.; MENESES, E.A.; LEITE, J.R. and MAZZARO, I. - "Temperature Dependence of Optical Transitions in AlGaAs", *J. Appl. Phys.* **89**, 6159 (2001).
49. LOURENÇO, S.A.; DIAS, I.F.L.; LAURETO, E.; DUARTE, J.L.; TOGINHO FILHO, D.O.; MENESES, E.A. and LEITE, J.R. - "Influence of Al Content on Temperature Dependence of Excitonic Transitions in Quantum Wells", *Eur. J. Physics B* **21**, 11 (2001).
50. MACHADO, M.; PIQUINI, P.; MOTA, R. and FAZZIO, A. - "Electronic and Structural Properties of Carbon Nanotubes Molecular Junction", *Materials Research Symposium Proceedings* **633**, A14.33.1 (2001).
51. MARTINI, S.; QUIVY, A.A.; TABATA, A. and LEITE, J.R. - "Influence of the temperature and excitation power on the optical properties of InGaAs/GaAs quantum wells grown on vicinal GaAs(001) surfaces", *J. Appl. Phys.* **90**, 2280 (2001).
52. MARTINS, A.; FANTINI, M.C.A. and SANTOS, A.D. - "Structural and magnetic study of the FePt thin films as a function of the deposition temperature", *Physica Status Solid (a)* **187-1**, (2001).
53. MIOTTO, R.; SRIVASTAVA, G.P. and FERRAZ, A.C. - "Dissociative Adsorption of PH₃ on the Si(001) Surface", *Phys. Rev. B* **63**, 125321 (2001).
54. MIOTTO, R.; SRIVASTAVA, G.P. and FERRAZ, A.C. - "First-Principles Calculations of the Adsorption and Dissociation of PH₃ on Si(001)-(2x1)", *Surface Science* **482**, 160-165 (2001).
55. MIOTTO, R.; SRIVASTAVA, G.P.; MIWA, R.H. and FERRAZ, A.C. - "A Comparative Study of Dissociative Adsorption of NH₃, PH₃ and AsH₃ on Si(001)-(2x1)", *J. Chem. Phys.* **114**, 9549-9556 (2001).
56. MUNE, P.; GOUVEA-ALCAIDE, E. and JARDIM, R.F. - "Magnetic hysteresis of the critical current density of polycrystalline (Bi-Pb)-Sr-Ca-Cu-O superconductors: a fingerprint of the intragranular and intergranular flux trapping", *Physica C* **275**, 354 (2001).
57. NOGUEIRA, R.N. and PETRILLI, H.M. - "Local Magnetic Properties of Co Grains in Bulk Ag and Cu: A First-Principles Study", *Phys. Rev. B* **63**, 012405 (2001)

58. OLIVEIRA, S.M.B. de; PARTITI, C.S.M. and ENZWEILER, J. - "Ochreous laterite: a nickel ore from Punto Gorda, Cuba", *Journal of South American Earth Sciences* **14/3**, 307-317 (2001).
59. ORELLANA, W. and FERRAZ, A.C. - "Ab Initio Study of Substitutional Nitrogen in GaAs", *Appl. Phys. Lett.* **78**, 1231-1233 (2001).
60. ORELLANA, W.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "O₂ Diffusion in SiO₂: Triplet versus Singlet", *Phys. Rev. Lett.* **87**, 155901 (2001).
61. PAZ, O.; SILVA, A.J.R. da, SÁENZ, J.J. and ARTACHO, E. - "Electron Correlation in the Si(100) Surface", *Surf. Sci.* **482-485**, 458-463 (2001).
62. PENDL JR., W.; COAQUIRA, J.A.H.; RECHENBERG, H.R. and SKOLOZDRA, R.V. - "Magnetic properties and hyperfine field at Sn site in GdCo₃Sn", *J. Magn. Magn. Mater.* **226-230**, 1142 (2001).
63. PUSEP, YU.A.; GUSEV, G.M.; CHIQUITO, A.J.; SOKOLOV, S.S.; BARAKOV, A.K.; TOROPOV, A.I. and LEITE, J.R. - "Vertical longitudinal magnetoresistance of semiconductor superlattices", *Phys. Rev. B* **63**, 165307 (2001).
64. RAMOS, L.E.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; CASTINEIRA, J.L.P.; ROSA, A.L. and LEITE, J.R. - "Structural, Electronic, and Effective-Mass Properties of Silicon and Zinc Blende Group-III Nitride Semiconductor Compounds", *Phys. Rev. B* **63**, 165210 (2001).
65. RECHENBERG, H.R.; COAQUIRA, J.A.H.; MARQUINA, C.; GARCÍA-LANDA, B.; IBARRA, M.R.; BENITO, A.M.; MASER, W.; MUÑOZ, E. and MARTÍNEZ, M.T. - "Mössbauer and magnetic characterization of carbon-coated small iron particles", *J. Magn. Magn. Mater.* **226-230**, 1930 (2001).
66. RIVELINO, R. and CANUTO, S. - "Theoretical Study of the Mixed Hydrogen-Bonded Complexes: H₂O-HCN-H₂O and H₂O-HCN-HCN-H₂O", *J. Phys. Chem. A* **105**, 11260 (2001).
67. ROCHA, W.R.; ALMEIDA, K.J. de; COUTINHO, K. and CANUTO, S. - "The Electronic Spectrum of N-Methylacetamide in Aqueous Solution: A Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Study", *Chemical Physics Letters* **345**, 171 (2001).
68. ROCHA, W.R.; COUTINHO, K., ALMEIDA, W.B. de and CANUTO, S. - "An Efficient Quantum Mechanical/Molecular Mechanics Monte Carlo Simulation of Liquid Water", *Chem. Phys. Letters* **335**, 127 (2001).
69. RODRIGUES, S.C.P.; SIPAHI, G.M.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Valence-band structure of undoped and p-doped cubic InGa_N/Ga_N multiple quantum wells", *Physica B* **302-303**, 106-113 (2001).
70. RODRIGUES, S.C.P.; SIPAHI, G.M.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Exchange-correlation effects on the hole miniband structure and confinement potential in zincblende Al_xGa_{1-x}N/GaN superlattices", *J. Phys.: Condens. Mat.* **13**, 3381 (2001).
71. SAGREDO, V.; GOYA, G.F.; SILVA, P. and CHALBAUD, L.M. - "Spin-glass behavior in Zn_{1-x}Mn_xIn₂Te₄", *J. Magn. Magn. Mat.* **226**, 1323 (2001).

72. SALES, F.V. de; SILVA, S.W. da; MONTE, A.F.G.; SOLER, M.A.G.; CRUZ, J.M.R.; SILVA, M.J. da; QUIVY, A.A., LEITE, J.R. and MORAIS, P.C. - "Excitation transfer through quantum dots measured by microluminescence: dependence on the quantum dot density", *Phys. stat. sol. (a)* **187**, 45 (2001).
73. SANDIM, M. J. R.; SUZUKI, P. A ; LACERDA, A H.; TORIKACHVILI, M. S. and JARDIM, R.F. - "Magnetoresistance at high magnetic fields in superconducting granular $\text{Sm}_{1.83}\text{Ce}_{0.17}\text{CuO}_{4-y}$ compounds", *Physica C* **265**, 354 (2001).
74. SCHMIDT, T.M.; JUSTO, J.F. and FAZZIO, A. - "Stacking Fault Effects in Pure and N-Type Doped GaAs", *Appl. Phys. Lett.* **78**, 907 (2001).
75. SCHMIDT, T.M.; MIWA, R.H.; FAZZIO, A. and MOTA, R. - "Ab Initio Calculations on the Compensation Mechanisms in InP", *Solid State Communications* **117**, 353 (2001).
76. SÉRGIO, C.S.; GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; OLSHANETSKII, E.B.; BYKOV, A.A.; MOSHEGOV, N.T.; BAKAROV, A.K.; TOROPOV, A.I.; MAUDE, D.K.; ESTIBALS, O. and PORTAL, J.C. - "Coexistence of a two-dimensional and three-dimensional Landau states in a wide parabolic quantum well", *Phys. Rev. B* **64**, 115314-1 (2001).
77. SILVA, A.J.R. da, BAIERLE, R.J., MOTA, R. and FAZZIO, A. - "Native Defects in Germanium", *Physica B* **302-303**, 364 (2001).
78. SILVA, A.J.R. da; DALPIAN, G.M.; JANOTTI, A. and FAZZIO, A. - "Two-Atom Structures of Ge on Si(100): Dimers versus Adatom Pairs", *Phys. Rev. Lett.* **87**, 036104 (2001).
79. SILVA, C.R.S. da and FAZZIO, A. - "Formation and Structural Properties of the Amorphous-Crystal Interface in a Nanocrystalline System", *Phys. Rev. B* **64**, 075301 (2001).
80. SILVA, C.R.S. da; VENEZUELA, P.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Theoretical Investigation of the Pressure Induced Cubic-Diamond- β -Sn Phase Transition in the $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ ", *Solid State Communications* **120**, 369 (2001).
81. SILVA, E.Z. da; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "How do Gold Nanowires Break?", *Phys. Rev. Lett.* **87**, 256102 (2001).
82. SOTOMAYOR CHOQUE, N.M., GUSEV, G.M., LEITE, J.R., BYKOV, A.A., LITVIN, L.V., MOSHEGOV, N.T. and TOROPOV A.I. - "Commensurability Oscillations in Wide Parabolic Well in the Presence of an In-plane Magnetic Field". *Physica B* **298**, 302 (2001).
83. SOUCHE, Y.; TUFFAILE, A.P.B.; SANTI, C.E.; NOVOSAD, V. and SANTOS, A.D. - "Figure of merit for transverse magneto-optical KERR effect", *J. Mag. Magn. Mat.* **226-230**, 1717 (2001).
84. SOUZA, J.R.; JARDIM, R.F.; MUCCILLO, R.; MUCCILLO, E.N.S.; TORIKACHVILI, M. S., NEUMEIER, J.J. - "Impedance spectroscopy evidence of the phase separation in $\text{La}_{0.4}\text{Pr}_{0.3}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ manganite", *Journal of Applied Physics* **89**, 6636 (2001).

85. SOUZA, L.E.S. de and CANUTO, S. - "Efficient Estimation of Second Virial Coefficients of Fused Hard-Spheres Molecules by an Artificial Neural Network", *Phys. Chem. Chem Phys.* **3**, 4762 (2001).
86. TELES, L.K., FURTHMÜLLER, J., SCOLFARO, L.M.R., LEITE, J.R. and BECHSTEDT, F. - "Influence of composition fluctuations and strain on gap bowing in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ". *Phys. Rev. B* **63**, 85204 (2001).
87. TORIKACHVILI, M. S.; JARDIM R. F.; CHANG, S.; MUCCILLO R.; NAKOTE H. and LACERDA A. H. - "Magnetoresistance measurements in $\text{UCu}_{4+x}\text{Al}_{8-x}$ compounds", *J. Mag. Mag. Matr.* **42**, 226-230 (2001).
88. TRIBUZY, C. V. B.; PAMPLONA-PIRES, M.; BUTENDEICH, R.; LANDI, S.M.; SOUZA, P.L.; MARQUES, G.E.; BITTENCOURT, A.C. and HENRIQUES, A B. - "Delta-doping superlattice in multiple quantum wells. *Physica E*, **11**, 261-267 (2001).
89. VARANDA, L.C.; JAFELICCI JR., M. and GOYA, G.F. - "Magnetic properties of spindle-type iron fine particles obtained from hematite", *J. Magn. Magn. Mat.* **226**, 1933 (2001).
90. VENEZUELA, P.; DALPIAN, G.M.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Ab Initio Determination of the Atomistic Structure of $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ Alloy", *Phys. Rev. B* **64**, 193202 (2001).
91. VENEZUELA, P.; SILVA, A.J.R. da; SILVA, C. da; DALPIAN, G.M. and FAZZIO, A. - "Ab Initio Studies of the $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Alloy and its Intrinsic Defects", *Computational Materials Science* **22**, 62 (2001).
92. WESTPHAL, C.H.; CARVALHO, Z.V.; BECERRA, C.C.; PADUAN FILHO, A. and PALACIO, F. - "Low-field remanent magnetization in the disordered antiferromagnet $\text{Cs}_2\text{Fe}_{1-x}\text{In}_x\text{Cl}_5\cdot\text{H}_2\text{O}$ ", *J. Mag. Mag. Mat.* **226**, 610-611 (2001).
93. YONAMINE, T. and SANTOS, A.D. - "Characterisation of magnetisation process in Y-Co/Tb-Co amorphous bilayers from SQUID and TMOKE", *J. Mag. Magn. Mat.* **226-230**, 1576 (2001).
94. YONAMINE, T.; TUFALILE, A.P.B.; VOGEL, J.; SANTOS, A.D.; VICENTIN, F.C. and TOLENTINO, H.C.N. - "Magnetic characterisation and X-ray magnetic circular dichroism study of amorphous YCo_2 films", *J. Mag. Magn. Mat.* **223**, 84 (2001).
95. ZHAO, S.; ASSALI, L.V.C.; JUSTO, J.F.; GILMER, G.H. and KIMERLING, L.C. - "Iron-Acceptor Pairs in Silicon: Structure and Formation Processes", *J. Appl. Phys.* **90**, 2744 (2001).

5d - Trabalhos Aceitos para Publicação:

1. ANTONELLI, A.; JUSTO, J.F. and FAZZIO, A. - "Interaction of As Impurities with 30° Partial Dislocations in Si: An Ab Initio Investigation", *J. Appl. Phys.*
2. BECHSTEDT, F.; FURTHMÜLLER, J.; FERHAT, M.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; DAVYDOV, V. YU, AMBACHER, O. and GOLDHAHN, R.

- "Energy gap and optical properties of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ", *Phys. Stat. Sol.-Rapid Research Note* (2002).
3. CANUTO, S.; COUTINHO, K. and TRZESNIAK, D. - "New Developments in Monte Carlo/Quantum Mechanics Methodology. The Solvatochromism of β -Carotene in Different Solvents", *Adv. Quantum Chemistry*.
 4. CHAUDHURI, P. and CANUTO, S. - "An Ab Initio Study of the Peptide Bond Formation Between Alanine and Glycine: Electron Correlation Effects on the Structure and Binding Energy", *J. Molec. Structure (Theochem)*.
 5. CHU, Z.; YELON, W.B.; MURAKAMI, R.K.; SILVA, P.S.M. da; VILLAS-BOAS, V. and MISSELL, F.P. - "A neutron diffraction study of the deuterium site occupancy in $\text{Nd}_3\text{Fe}_{17}\text{D}_{15.5}$ ", *IEEE Trans. Magn.*
 6. DALPIAN, G.M.; VENEZUELA, P.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Ab Initio Calculations of Vacancies in $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ ", *Appl. Phys. Lett.*
 7. FAGAN, S.B.; MOTA, R.; BAIERLE, R.J.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Ab Initio Study of an Organic Molecule Interacting with a Silicon-Doped Carbon Nanotube", *Diamond & Related Materials*.
 8. FAGAN, S.B.; MOTA, R.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Energetics and Structural Properties of Adsorbed Atoms and Molecules on Silicon-Doped Carbon Nanotubes", *Materials Characterization*.
 9. FERRAZ, A.C. and MIOTTO, R. - "Zn-Induced Features at the GaAs(110) Surface: A First-Principles Study", *Vacuum*.
 10. GOYA, G.F. and RECHENBERG, H.R. - "On the magnetic properties of mechanosynthesized and ball-milled spinel ferrites", *J. Metastable Nanocryst. Mater.*
 11. GOYA, G.F.; SOUZA, J.A. and JARDIM, R.F. - "Mössbauer Spectroscopy and Magnetoresistivity of ^{57}Fe Substituted Mn in $\text{La}_{0.7-x}\text{Y}_x\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ Manganites", *J. Appl. Phys.*
 12. HANAMOTO, L.K.; TRIBUZY, C.V.; HENRIQUES, A.B.; SOUZA, P.L. and YAVICH, B. - "Interfacial layers and dopant incorporation in InP/InGaAs superlattices", *Brazilian Journal of Physics*.
 13. HUSBERG, O.; KHARTCHENKO, A.; VOGELSANG, H.; AS, D.J.; LISCHKA, K.; NORIEGA, O.C.; TABATA, A.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Photoluminescence associated with quantum dots in cubic GaN/InGaN/GaN double heterostructures", *Physica E* **13**, 1090 (2002).
 14. JONEN, S.; RECHENBERG, H.R. and CAMPO, J. - "Rare earth effects on the magnetic behavior of $\text{R}_6\text{Fe}_{11-x}\text{Al}_{3+x}$ compounds", *J. Magn. Magn. Mater.*
 15. JUSTO, J.F.; ANTONELLI, A. and FAZZIO, A. - "Arsenic Segregation, Pairing and Mobility on the Partial Dislocation in Silicon", *J.Phys.B*.

16. JUSTO, J.F.; MOTA, F.B. and FAZZIO, A. - "First-Principles Investigation of a-SiN_x:H", *Phys. Rev. B*.
17. KLAUTAU, A.B. and FROTA-PESSÔA, S. - "Magnetism of Co Clusters Embedded in Cu(001) Surfaces: An Ab Initio Study", *Surface Science*.
18. KÖHLER, U.; AS, 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. and LEITE, J.R. - "Optical characterization of cubic AlGa_N/Ga_N quantum wells", *Phys. Stat. Sol. (a)* **192**, 129 (2002).
19. LEITE ALVES, H.W.; ALVES, J.L.A.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Planar force-constant method for lattice dynamics of cubic III-Nitrides", *Braz. J. Phys.* **32**, 448 (2002).
20. MIOLA, E.J.; SOUZA, S.D. de; OLZON-DIONYSIO, M.; SPINELLI, D. and RECHENBERG, H.R. - "Plasma nitriding of pure iron at several temperatures", *Phys. Stat. Sol. (a)*.
21. MIOTTO, R.; FERRAZ, A.C. and SRIVASTAVA, G.P. - "Comparative Study of the Adsorption of C₂H₄ on the Si(001) and Ge(001) Surfaces", *Surface Science*.
22. MOTA, F.B.; JUSTO, J.F. and FAZZIO, A. - "Defect Centers in a-SiN_x: Electronic and Structural Properties", *Braz. Journal of Physics*.
23. ORELLANA, W.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Influence of Spin State on Dynamical Processes of O₂ in α-Quartz", *Material Research Society*.
24. PADUAN-FILHO, A. and BECERRA, C.C. - "Magnetic properties and critical behavior of pure and diluted two dimensional weak ferromagnet (CH₃NH₃)₂Mn_{1-x}Cd_xCl₄. (x = 0, 0.05)", *Journal of Applied Physics*.
25. PAIVA, R. de; NOGUEIRA, R.A.; OLIVEIRA, C. de; LEITE ALVES, H.W.; ALVES, J.L.A., SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "First principles calculations of the effective mass parameters of AlGa_N and ZnCdTe alloys", *Braz. J. Phys.* **32**, 405 (2002).
26. PARTITI, C.S.M.; IMBERNON, R.A.L.; FRANCO, D.R.; BERQUÓ, T.S. and BEVILACQUA, J.E. - "Magnetic characterization of sediments of Urban supply lakes from São Paulo, Brazil", *Hyperfine Interactions*.
27. PUSEP, YU.A.; SOKOLOV, S.S.; FORTUNATO, W.; GALZERANI, J.C. and LEITE, J.R. - "Raman probing of the wave function of collective excitations in the presence of disorder", *Physica B*.
28. QUINTÃO, A.D.; COUTINHO, K. and CANUTO, S. - "Theoretical Study of the Hydrogen Bond Interaction Between Methylene Blue and Water", *Int. J. Quantum Chem.*
29. RAMOS, L.E.; FURTHMÜLLER, J.; BECHSTEDT, F.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Ab Initio Theory of Native Defects in Alloys: Application to Charged N Vacancies in Al_xGa_{1-x}N", *J. Phys.: Condensed Matter* **14**, 2577 (2002).

30. RAMOS, L.E.; FURTHMÜLLER, J.; LEITE, J.R.; SCOLFARO, L.M.R. and BECHSTEDT, F. - "Carbon-based defects in GaN: Doping behavior", *Phys. Stat. Sol.*
31. RAMOS, L.E.; FURTHMÜLLER, J.; LEITE, J.R.; SCOLFARO, L.M.R. and BECHSTEDT, F. - "Substitutional carbon in III-nitrides: ab initio description of shallow and deep levels", *Phys. Rev. B*.
32. RECHENBERG, H.R. and IBARRA, M.R. - "Spin dynamics of nanostructured $\text{La}_{1/3}\text{Ca}_{2/3}\text{MnO}_3$ ", *J. Metastable Nanocryst. Mater.*
33. RECHENBERG, H.R.; BRANDI, S.D. and PADILHA, A.F. - "Mössbauer study of the α' phase formation in Fe-Cr-based duplex stainless steel", *Hyperfine Interactions*.
34. REIS, S.T.; FARIA, D.L.A.; MARTINELLI, J.R.; PONTUSCHKA, W.M.; DAY, D.E. and PARTITI, C.S.M. - "Structural features of lead iron phosphate glasses", *Journal of Noncrystalline Solids*.
35. RISSI, E.; RIVELINO, R. and CANUTO, S. - "Application of Density Functional Theory Methods in Radio-Astronomy Calculations", *Phys. Rev. A*.
36. RIVELINO, R.; LUDWIG, V.; RISSI, E. and CANUTO, S. - "Theoretical Studies of Hydrogen Bonding in Water-Cyanides and in the Base Pair Gu-Cy", *J. Mol. Structure*.
37. RODRIGUES, S.C.P.; SIPAHI, G.M.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Hole charge localization and band structures of p-doped GaN/InGaN and GaAs/InGaAs semiconductor heterostructures", *J. Phys. Condensed Matter* **14**, 5813 (2002).
38. RODRIGUES, S.C.P.; SIPAHI, G.M.; SCOLFARO, L.M.R.; NORIEGA, O.C.; LEITE, J.R.; FREY, T.; AS, D.J.; SCHIKORA, D. and LISCHKA, K. - "Inter and Intraband Transitions in Cubic Nitride Quantum Wells", *Phys. Stat. Sol. (a)* **190**, 121 (2002).
39. SALES, F.V. de; SILVA, S.W. da; MONTE, A.F.G.; SOLER, M.A.G.; CRUZ, J.M.R.; SILVA, M.J. da; QUIVY, A.A.; LEITE, J.R. and MORAIS, P.C. - "Investigation of optical and structural properties of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum wells grown on vicinal GaAs(001) substrates", *Journal of Physics: Condensed Matter*.
40. SCOLFARO, L.M.R. - "Phase-separation in cubic group-III nitrides", *Phys. Stat. Sol. (a)* **190**, 15 (2002).
41. SERRANO, A. and CANUTO, S. - "Solvent Effects in the First Dipole Hyperpolarizability of Phenol Blue. A Bond-Length Alternation Analysis", *Int. J. Quantum Chem.*
42. SILVA, C.R.S. da; JUSTO, J.F. and FAZZIO, A. - "Structural Order and Clustering in Annealed a-SiC and a-SiC:H Films", *Material Research Society*.
43. SILVA, C.R.S. da; JUSTO, J.F. and FAZZIO, A. - "Structural Order and Clustering in Annealed α -SiC and α -SiC:H Films", *Phys. Rev. B*.

44. SOTOMAYOR CHOQUE, N.M.; GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; BYKOV, A.A.; BAKAROV, A.K. and TOROPOV A.I. - "Geometrical resonance in the resistivity of wide quantum wells", *Physica E* .
45. TABATA, A.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; KHARCHENKO, A.; FREY, T.; AS, D.J.; SCHIKORA, D.; LISCHKA, K.; FURTHMÜLLER, J. and BECHSTEDT, F. - "Phase separation suppression in InGaN epitaxial layers due to biaxial strain", *Appl. Phys. Lett.* **80**, 769 (2002).
46. TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; FURTHMÜLLER, J. and BECHSTEDT, F. - "Spinodal decomposition in $B_xGa_{1-x}N$ and $B_xAl_{1-x}N$ alloys", *Appl. Phys. Lett.* **80**, 1177 (2002).
47. TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; FURTHMÜLLER, J.; BECHSTEDT, F.; FREY, T.; AS, D.J. and LISCHKA, K. - "Phase separation and gap bowing in zinc-blende InGaN, InAlN, BGeN, and BAlN alloy layers", *Physica E* **13**, 1086 (2002).
48. TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; FURTHMÜLLER, J.; LEITE, J.R. and BECHSTEDT, F. - "Phase diagram, chemical bonds, and gap bowing of cubic InAlN alloys: ab initio calculations", *J. Appl. Phys.*
49. VENEZUELA, P.; DALPIAN, G.M.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Vacancy-Mediated Diffusion in Disordered Alloys: Ge Self-Diffusion in $Si_{1-x}Ge_x$ ", *Phys. Rev. B*.
50. VIVAS, P.G.; SILVA, E.E. da; CARVALHO, L.C. de; ALVES, J.L.A.; LEITE ALVES, H.W.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Adsorption of Si and C atoms over SiC (111) surfaces", *Braz. J. Phys.* **32**, 396 (2002).
51. ZHAO, S.; ASSALI, L.V.C.; JUSTO, J.F.; GILMER, G.H. and KIMERLING, L.C. - "Structure and Bonding of Iron-Acceptor Pairs in Silicon", *Braz. J. of Physics*.

5e - Trabalhos Submetidos à Publicação:

1. CARVALHO e SILVA, M.L.M.; PARTITI, C.S.M.; PETIT, S.; ENZWEILER, J.; NETTO, S.M. and OLIVEIRA, S.M.B. - "Characterization of Ni-containing Goethites by Mössbauer spectroscopy and other techniques", *Hyperfine Interactions*.
2. CHAUDHURI, P. and CANUTO, S. - "Correlation Effects Peptide Molecules", *Indian Journal of Physics*.
3. GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E., LEITE, J.R.; BARAKOV, A.K.; TOROPOV, A.I.; ESTIBALS, O. and PORTAL, J.C. - "Magnetotransport of a quasi-three-dimensional electron gas in the lowest Landau level", *Phys. Rev. Lett.*
4. LEITE, J.R. - "Origin of the radiative emission in blue-green light emitting diodes and laser diodes based on GaN/InGaN heterostructures", *Microelectronics Journal*.

5. NOGUEIRA, R.N. and PETRILLI, H.M. - Hyperfine Fields at Co Clusters in Bulk Ag and Cu by a First - Principles Study: The role of the Nearest Neighborhood”, *J. Phys. Cond. Matter.*
6. PUSEP, YU. A.; SILVA, M.T.O.; FERNANDEZ, J.R.L.; CHITTA, V.A.; LEITE, J.R.; FREY, T.; AS, D.J.; SCHIKORA, D. and LISCHKA, K. - “Raman Study of Collective Plasmon-LO Phonon Excitations in Cubic GaN and Al_xGa_{1-x}N Epitaxial Layers”, *Appl. Phys. Lett.*
7. PUSEP, YU. A.; SOKOLOV, S.S.; FORTUNATO, W.; GALZERANI, J.C. and LEITE, J.R. - “Raman Probe of the Wave Function of Localized Collective Excitations”, *Phys. Rev. B.*
8. RODRIGUES, C.G.; FERNANDEZ, J.R.L.; FREIRE, V.N.; VASCONCELOS, A.R.; LEITE, J.R.; CHITTA, V.A. and LUZZI, R. - “Hole mobility in zincblende GaN”, *Phys. Rev. B.*
9. SILVA, M.J. da; QUIVY, A.A.; GONZALEZ-BORRERO, P.P.; MAREGA JR, E. and LEITE, J.R. - “Atomic-force-microscopy study of self-assembled InAs quantum dots along their complete evolution cycle”, *Journal of Crystal Growth.*
10. TERRAZOS, L.A.; PETRILLI, H.M.; MARSZALEK, M.; SAITOVICH, H.; SILVA, P.R.J.; BLAHA, P. and SCHWARZ, K. - “Electric Field Gradients at Ta in Zr and Hf Intermetallic Compounds”, *Solid State Comm.*
11. TRZESNIAK, D., CAIRES, A.C.F., ALMEIDA, P.C. and CANUTO, S. - “Theoretical and Experimental Study of the Spectroscopic Properties of the E-64 Protease Inhibitor”, *J. Molec. Structure (Theochem).*

5f - Capítulos de Livros:

1. CANUTO, S. - “Estrutura de Átomos, Moléculas e Biomoléculas. Cem Anos de Mecânica Quântica” – Livro: “100 Anos de Física Quântica”, organizado por Mahir S. Hussein e Sílvio R.A. Salinas, Editora Livraria da Física, São Paulo, SP, pág. 75 (2001).
2. FAZZIO, A. - “Do Átomo de Thomas-Fermi à Dinâmica Molecular Quântica” - Livro: “100 Anos de Física Quântica”, organizado por Mahir S. Hussein e Sílvio R.A. Salinas, Editora Livraria da Física, São Paulo, SP, pág. 205 (2001).

5g - Livro:

1. WATARI, K. - “Mecânica Clássica”, vol. 1, Editora Livraria da Física, São Paulo, SP (2001).