

Departamento de Física dos
Materiais e Mecânica
D F M T

Relatório de Atividades
2003



Instituto de Física
Universidade de São Paulo

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 Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas - LESBT
(a) Grupo de Baixas Temperaturas
(b) Grupo de Transição de Fase e Supercondutividade

Iran Mamedes de Amorim

Secretário do Laboratório de Materiais Magnéticos - LMM

Mônica Jimenez Clauzet

Secretária do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores – LNMS-MBE

Marisa Fernandes da Silva

Sandra Regina Rodrigues Ribeiro

Secretárias do Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Impressão

Gráfica do IFUSP (outubro de 2005)

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 2003.....
- 2b. Disciplinas de Graduação Ministradas no 2º Semestre de 2003.....
- 2c. Disciplinas de Pós-Graduação Ministradas no 1º Semestre de 2003.....
- 2d. Disciplinas de Pós-Graduação Ministradas no 2º Semestre de 2003
- 2e. Seminários
- 2f. Participação de Docentes em Comissões Organizadoras de Eventos....
- 2g. Projetos de Pós-Doutorado
- Concluídos
- Em Andamento
- 2h. Doutorados.....
- Concluídos
- Em Andamento
- 2i. Mestrados.....
- Concluídos
- Em Andamento
- 2j. 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. Participação de Docentes em Concursos no IFUSP como Candidatos ..
- 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
- 3h. Participação em Comissões Eleitorais

4 - ATIVIDADES DE PESQUISA

- 4a. Grupos de Pesquisa
- 4b. Trabalhos em Andamento ou Concluídos em 2003
- 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. Publicação de Livro

1 - COMPOSIÇÃO DO DEPARTAMENTO

1a - Chefia:

Chefe	Suplente
HERCÍLIO RODOLFO RECHENBERG (23.02.2002 a 22.02.2004)	NEI FERNANDES DE OLIVEIRA JR. (23.02.2002 a 22.02.2004)

1b - Conselho Departamental:

PROFESSORES TITULARES (MS-6)
Adalberto Fazzio Armando Corbani Ferraz Carlos Castilla Becerra Frank Patrick Missell José Roberto Leite (4) Hercílio Rodolfo Rechenberg Marília Junqueira Caldas (1) Nei Fernandes de Oliveira Jr. Sylvio Roberto Accioly Canuto

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 Helena Maria Petrilli

PROFESSORES ASSOCIADOS (MS-5) (08.10.2003 a 07.10.2005)	
Titulares	Suplentes
André Bohomoletz Henriques Renato de Figueiredo Jardim Lucy Vitória Credídio Assali Antônio Domingues dos Santos	Armando Paduan Filho Valdir Bindilatti Helena Maria Petrilli Guennadii Michailovich Gusev

PROFESSORES DOUTORES (MS-3) (03.03.2001 a 02.03.2003)	
Titulares	Suplentes
Euzi Conceição Fernandes da Silva Carmen Silva de Moya Partiti Carlos Henrique Westphal	Luísa Maria Ribeiro Scolfaro Valquíria Villas Boas Gomes Missell (2) Ewout Ter Haar

PROFESSORES DOUTORES (MS-3) (12.03.2003 a 11.03.2005)	
Titulares	Suplentes
Antônio José Roque da Silva (3) Ewout Ter Haar Gerardo Fabián Goya	Kazunori Watari Carmen Silvia de Moya Partiti Euzi Conceição Fernandes da Silva
Kazunori Watari (a partir de 05.11.2003) Ewout Ter Haar Gerardo Fabián Goya	Carmen Silvia de Moya Partiti Euzi Conceição Fernandes da Silva
REPRESENTANTES DISCENTES - PÓS-GRADUAÇÃO (30.09.2002 a 29.09.2003)	
Titular	Suplente
Gustavo Martini Dalpian	Ferenc Diniz Kiss
Ferenc Diniz Kiss (a partir de 06.08.2003)	
REPRESENTANTES DISCENTES - PÓS-GRADUAÇÃO (05.11.2003 a 04.11.2004)	
Titular	Suplente
Ferenc Diniz Kiss	Fábio de Oliveira Jorge

1c - Corpo Docente:**PROFESSORES TITULARES (MS-6)**

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

PROFESSORES ASSOCIADOS (MS-5)

André Bohomoletz Henriques	RDIDP
Antônio Domingues dos Santos	RDIDP
Antônio José Roque da Silva (3)	RDIDP
Armando Paduan Filho	RDIDP
Guennadii Michailovich Gusev	RDIDP

Helena Maria Petrilli	RDIDP
Lucy Vitória Credidio Assali	RDIDP
Renato de Figueiredo Jardim	RDIDP
Valdir Bindilatti	RDIDP

PROFESSORES DOUTORES (MS - 3)

Carmen Silvia de Moya Partiti	RDIDP
Euzi Conceição Fernandes da Silva	RDIDP
Ewout Ter Haar	RDIDP
Gerardo Fabián Goya	RDIDP
Kazunori Watari	RDIDP
Luísa Maria Ribeiro Scolfaro	RDIDP
Valquíria Villas Boas Gomes Missell (2)	RDIDP

(1) Transferência, nos termos do artigo 130, inciso I, § 1º do Regimento Geral, do Departamento de Física Experimental para Departamento de Física dos Materiais e Mecânica. Publicação no Diário Oficial de 21.01.2003.

(2) Afastamento, com prejuízos dos vencimentos e das demais vantagens do cargo, de 29.10.2001 a 28.10.2003. Solicitou demissão do quadro de docentes do IFUSP após o término do afastamento.

(3) Aprovado no concurso Livre-Docência, Ref. MS-5, junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica. A nomeação foi publicada no Diário Oficial de 12.12.2003.

(4) Afastado, sem prejuízos dos vencimentos ou das demais vantagens do cargo, para exercer o cargo de Diretor da Comissão de Programas Horizontais e Instrumentais do CNPq e do MCT, Brasília, DF, enquanto perdurar a sua investidura no cargo. Despacho do Reitor de 29.05.2003. Publicação no Diário Oficial de 05.06.2003.

1d - Pessoal Técnico e Administrativo:

TÉCNICO:

<p>Carlos Alberto Barioni Eronides Alves de Almeida Fábio Henrique Grossy Flávio do Carmo Fontenelle José Alexandre dos Santos José Geraldo Chagas José Teodósio da Silva Luiz Carlos dos Santos Marcelo Shiroma Lancarotte Márcia Ribeiro Marco Antônio Meira Olimpio Ribeiro da Fonseca Neto Paulo Sérgio Martins da Silva Renato Cohen Rui Fernandes de Oliveira Sérgio Antônio Romero</p>
--

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
Mônica Jimenez Clauzet	Laboratório de Novos Materiais Semicondutores
Iran Mamedes de Amorim	Laboratório de Materiais Magnéticos
Marisa Fernandes da Silva Sandra Regina Rodrigues Ribeiro	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 2003:**

Adalberto Fazzio	Física Moderna II	FNC 0376
André Bohomoletz Henriques	Física para Engenharia IV	FAP 2296
Antônio Domingues dos Santos	Introdução às Medidas em Física	FAP 0181
Antônio José Roque da Silva	Física para Engenharia Elétrica III	FAP 2292
Armando Corbani Ferraz	Eleticidade I	FGE 0270
Armando Paduan Filho	Laboratório de Física Moderna	FNC 0377
Carlos Castilla Becerra	Física para Engenharia III	FGE 2203
Carmen Sílvia de Moya Partiti	Física do Meio Ambiente	FAP 0351
Euzi Conceição Fernandes da Silva	BÔNUS NOTURNO	
Ewout Ter Haar	Laboratório de Física para Ciências	FGE 1189
	Farmacêuticas	
Gerardo Fabian Goya	Física Geral e Experimental para Engenharia I	FEP 2195
Helena Maria Petrilli	Física para Ciências Biológicas	FGE 1187
José Roberto Leite	BÔNUS NOTURNO	

Kazunori Watari	Física Matemática I	FMA 0204
Lucy Vitória Credidio Assali	Física para Engenharia Elétrica III	FAP 2292
Luísa Maria Ribeiro Scolfaro	Física III para o Instituto de Química	FGE 2245
Marília Junqueira Caldas	Física para Ciências Biológicas	FGE 1187
Nei Fernandes de Oliveira Jr.	Termodinâmica	FMT 0308
Renato de Figueiredo Jardim	Introdução às Medidas em Física	FAP 0181
Sylvio Roberto Accioly Canuto	Introdução à Física Atômica e Molecular	FNC 0315
Valdir Bindilatti	BÔNUS NOTURNO	

2b - Disciplinas de Graduação Ministradas no Segundo Semestre de 2003:

Adalberto Fazzio	Física dos Materiais	FMT 0502
André Bohomoletz Henriques	Física IV	FAP 0212
Antônio Domingues dos Santos	Física Experimental V	FNC 0313
Antônio José Roque da Silva	Grupos e Tensores	FMT 0429
Armando Corbani Ferraz	BÔNUS NOTURNO	
Armando Paduan Filho	Física Experimental (IQ)	FGE 2255
Carlos Castilla Becerra	Física para Engenharia IV	FAP 2296
Carmen Sílvia de Moya Partiti	Introdução à Espectroscopia	FAP 0425
Euzi Conceição Fernandes da Silva	Fundamentos da Mecânica	FAP 0151
Ewout Ter Haar	Física para Ciências Farmacêuticas	FAP 0184
Gerardo Fabian Goya	Física I (IQ)	FEP 2145
Guennadii Michailovich Gusev	Eletricidade I (IQ)	FGE 0270
Hercílio Rodolfo Rechenberg	Física Moderna I	FNC 0375
José Roberto Leite	AFASTADO	AFASTADO
Kazunori Watari	Física Matemática I	FMA 0204
Lucy Vitória Credidio Assali	Introdução à Física do Estado Sólido	FMT 0402
Luísa Maria Ribeiro Scolfaro	LICENÇA-PRÊMIO	
Marília Junqueira Caldas	Introdução à Física do Estado Sólido	FMT 0402
Nei Fernandes de Oliveira Jr.	Termodinâmica I	FMT 0159
Renato de Figueiredo Jardim	Física para Ciências Farmacêuticas	FAP 0184
Sylvio Roberto Accioly Canuto	Física IV	FNC 0311
Valdir Bindilatti	Física Moderna I	FNC 0305
Valquíria Villas Boas Gomes Missell	AFASTADA	

2c - Disciplinas de Pós-Graduação Ministradas no Primeiro Semestre de 2003:

Guennadii Michailovich Gusev	Introdução à Nanociência	FMT 741
Hercílio Rodolfo Rechenberg	Fundamentos do Magnetismo em Sólidos	FMT 753

2d - Disciplinas de Pós-Graduação Ministradas no Segundo Semestre de 2003:

Antônio José Roque da Silva	Física do Estado Sólido	FMT 5814
-----------------------------	-------------------------	----------

2e - Seminários:**Notícias do Encontro Anual da Sociedade Americana de Física**

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Prof. Dr. Antônio José Roque da Silva, DFMT-IFUSP

Data: 04 de abril de 2003

The Emperors New Superconductors: Are They Paradigms, or Simply One-Offs?

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Dr. Warren E. Pickett, Universidade da Califórnia, Departamento de Física, EUA

Data: 19 de maio de 2003

A Natureza de Defeitos em Bulk e em Superfície de Semicondutores

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Gustavo Martini Dalpian, Estudante de Doutorado, DFMT-IFUSP

Data: 08 de agosto de 2003

Vectorial Mapping of Exchange Anisotropy in (IrMn/FeCo) Multilayers

Seminário do Laboratório de Materiais Magnéticos

Dr. Leonard Spinu, University of New Orleans, Advanced Materials Research Institute and Department of Physics, New Orleans, LA, EUA

Data: 20 de agosto de 2003

Chemical Concepts for Molecule Derived Nanomaterials

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Dr. Sanjay Mathur, Institut für Neue Materialien (INM GmbH), Saarbrücken Alemanha

Data: 22 de agosto de 2003

Analysis of Semiconductor Nano-Structures by Cross-Sectional Scanning Tunneling Microscopy

Seminário Especial do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Dr. Paul M. Koenraad, Eindhoven University, COBRA Inter-university Research Institute, Department of Physics, Eindhoven, Holanda

Data: 01 de setembro de 2003

Propriedades Eletrônicas de Super-Redes Degeneradas Tipo I e Tipo II

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

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

Data: 23 de setembro de 2003

Interação de Fármacos com Filmes de Fosfolipídios

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Dr. Osvaldo Novais Oliveira Jr., Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Carlos, SP

Data: 03 de outubro de 2003

Ligações de Hidrogênio em Meio Líquido

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Eudes Eterno Fileti, Estudante de Doutorado, DFMT-IFUSP

Data: 17 de outubro de 2003

O Funcional de Troca e Correlação Não Empírico Meta-GGA

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Dr. Marcelo Ferreira da Silva, Pós-Doutorando, DFMT-IFUSP

Data: 24 de outubro de 2003

Estrutura Eletrônica de Materiais Orgânicos

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica em conjunto com o "Journal Club" do Grupo Teórico de Materiais

Prof. Dr. Jordan Del Nero, Universidade Federal do Pará, Departamento de Física). Belém, Pará

Data: 31 de outubro de 2003

Propriedades Eletrônicas e Estruturais do Elétron Hidratado

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Valdemir Enéias Ludwig, Estudante de Doutorado, DFMT-IFUSP

Data: 07 de novembro de 2003

Optical Characterization of Nitride Semiconductors

Seminário do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores

Prof. Dr. Jaime A. Freitas Jr., Naval Research Laboratory, Washington D.C., EUA

Data: 07 de novembro de 2003

Propriedades de Polímeros Eletrônicos e Aplicações em Dispositivos Optoeletrônicos

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Dr. Roberto Mendonça Faria, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Carlos, SP

Data: 12 de novembro de 2003

Transistor de Filme Fino Baseado em Óxido Semicondutor TranspareNte

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Dr. Wanderlã Luis Scopel, Pós-Doutorando, DFMT-IFUSP

Data: 14 de novembro de 2003

Van der Waals Density Functional for Layered Structures

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Dr. Neemias Alves de Lima, Pós-Doutorando, DFMT-IFUSP

Data: 21 de novembro de 2003

Cálculo 21 Dimensional do Desdobramento por Tunelamento no Malonaldeído. Um Estudo Multi-Configuracional Time-Dependent Hartree

Seminário Extra do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Dr. Maurício Domingues Coutinho Neto, Technische Universität Muenchen, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Muenchen, Alemanha

Data: 04 de dezembro de 2003

Modelização da Estrutura Magnética e da Magetoimpedância em Condutores Magnéticos Cilíndricos

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Dr. Luiz Guilherme Costa Melo, Pós-Doutorando, DFMT-IFUSP

Data: 10 de dezembro de 2003

Si on GaN Surfaces: Incorporation Mechanisms and Effect on Surfacermorphology

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Dra. Andréia Luísa da Rosa, School of Life Sciences, Chemistry Department, University of Sussex, Inglaterra

Data: 17 de dezembro de 2003

2f - Participação de Docentes em Comissões Organizadoras de Eventos:

Adalberto Fazzio

XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambu, MG

Comitê Organizador Local

A. Fazzio (Coordenador Geral)

C.R.Mendonça (IFSC)

L.H.D. Cescato (IF-UNICAMP)

Período: de 06 a 10 de maio de 2003

20th International Conference on Amorphous and Microcrystalline Semiconductors - ICAMS-20, Campos do Jordão, SP

Comitê Organizador

I. Chambouleyron (Chairman, IF-UNICAMP)

F. Alvarez (co-Chairman, IF-UNICAMP)

A.Fazzio (IFUSP)

M. Stutzmann (Alemanha)

P.C. Taylor (EUA)

S. Camargo

Período: de 25 a 29 de agosto de 2003

Antônio José Roque da Silva

Curso de Verão - IFUSP'2003

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

A.J. R. da Silva (Coordenador)

A. Deppman

G.C. Marques

I.L.Caldas

R.D. Pinto

R. Lichtenthaler Filho

Período: de 03 a 08 de Fevereiro de 2003

Gerardo Fabián Goya

International Symposium on Metastable, Mechanically Alloyed and Nanocrystalline Materials (ISMANAM2003), Foz de Iguazu, Paraná

National Program Committee

Comissão Organizadora

C.S. Kiminami

DEMa/UFSCar (chair)

A.R. Yavari

LTPCM INPG - France

F. Audebert

Univ. Buenos Aires - Argentina

M. Knobel

IF-UNICAMP

R.H.G.A. Kiminami

DEMa/UFSCar

W.J. Botta Filho

DEMa/UFSCar (Chair)

D.S. Santos

PEMM-COPPE/UFRJ

F. Galembeck

IQ-UNICAMP

L.A. Pessan

DEMa/UFSCar

M. Morelli

DEMa/UFSCar

Período: de 28 a 29 de agosto de 2003

Marília Junqueira Caldas
The 22nd International Conference on Defects in Semiconductors, Aarhus,
Dinamarca

Program Committee

F. Danie Auret
 Univ. of Pretoria, South Africa
 Marilia J. Caldas
 Univ. of São Paulo, Brazil
 Weimin M. Chen
 Linköping Univ., Sweden (Chairman)
 Peter Deak
 Tech Univ. of Budapest, Hungary
 Vadim V. Emtsev
 A.F. Ioffe Physicotechnical Institute, Russia
 Stefan Estreicher
 Texas Tech, USA
 Evan R. Glaser
 NRL, USA
 Ulrich Gösele
 Max-Planck-Institut, Germany
 Eugene E. Haller
 Univ. of California Berkeley, USA
 Kohei Itoh
 Keioh Univ., Japan
 Robert Jones
 Univ. of Exeter, United Kingdom.
 Hiroshi Katayama-Yoshida
 Osaka Univ., Japan
 Vladimir P. Markevich
 Institute of Solid State and Semiconductor
 Physics, Byelorussia
 Bruno K. Meyer
 Justus-Liebig-Univ., Germany
 Brian Bech Nielsen
 The University of Aarhus, Denmark
 Risto M. Nieminen
 Helsinki Univ of Technology, Finland
 Masashi Suezawa
 Tohoku Univ., Japan
 Chris G. Van de Walle
 Palo Alto Research Center, USA

International Advisory Committee

F. Danie Auret
 Univ. of Pretoria, South Africa
 Marilia J. Caldas
 Univ. of São Paulo, Brazil
 Jim Chadi
 NEC Research Institute, Inc., USA
 Bernard Clerjoud
 Univ. Pierre et Marie Curie, France
 Vadim V. Emtsev
 A. F. Ioffe Physicotechnical Institute, Russia
 Wolfgang Jantsch
 Johannes Kepler Univ., Austria
 Robert Jones
 Univ. of Exeter, United Kingdom
 Hiroshi Katayama-Yoshida
 Osaka Univ. Japan
 Lionel C. Kimerling
 Massachusetts Institute of Technology, USA
 Vladimir P. Markevich
 Institute of Solid State and Semiconductor Physics,
 Minsk, Byelorussia
 Brian Bech Nielsen
 The University of Aarhus, Denmark
 Michael Stavola
 Lehigh University, USA
 Martin Stutzmann
 Technische Univ. München, Germany
 Masashi Suezawa
 Tohoku Univ., Japan
 Chris Van de Walle
 Xerox Palo Alto Research Center, USA

Período: de 28 de julho a 1^o de agosto de 2003

II Encontro da SBPMat –Brazilian MRS Meeting 2003

Comitê Científico

Ivo Hummelgen

Univ. Federal do Paraná

Marília Junqueira Caldas

Univ. de São Paulo

Marysilvia Ferreira

Univ. Federal do Rio de Janeiro

Roberto Luiz Moreira

Univ. Federal de Minas Gerais

Sergio Mergulhão

Univ. Federal de São Carlos

Período: de 26 a 29 de outubro de 2003

Renato de Figueiredo Jardim

International Workshop on Unconventional Superconductors, Campinas, SP

Comitê Organizador

O. F. de Lima (co-Chairman, IF-UNICAMP)

Y. Kopelevich (co-Chairman, IF-UNICAMP)

A.O. Caldeira (IF-UNICAMP)

C. Rettori (IF-UNICAMP)

E. Granato (INPE),

R. F. Jardim (IFUSP)

Período: de 20 a 24 de maio de 2003

2g - Projetos de Pós-Doutorado:

Concluídos

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

Segunda Vigência: 1º julho de 2002 - 31 de janeiro de 2003

Dr. Fernando de León Pérez

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Supervisor: Prof. Dr. Armando Corbani Ferraz

Título do Projeto: Adsorção e dissociação molecular nos processos de passivação de superfícies semicondutoras

Bolsa FAPESP - Proc. n° 02/01356-9

Processo USP n° 2002.1.23316.1.6

Primeira Vigência: 1° de agosto de 2002 - 31 de julho de 2003

Dra. Thelma de Souza Berquó

Laboratório de Materiais Magnéticos (LMM)

Supervisora: Profa. Dra. Carmen Sílvia 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 n° 2000.1.27112.1.4

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

Segunda Vigência: a partir de 1° de setembro de 2001 - (suspensão da vigência, no período de dezembro de 2001 a abril de 2002, em virtude da realização de um estágio de 5 meses na Escócia - Uk)

Reativação da Segunda Vigência: 1° de maio de 2002 - 31 de janeiro de 2003

Terceira Vigência: 1° de fevereiro de 2003 - 31 de janeiro de 2004

Cancelamento a partir de novembro de 2003, para realizar um estágio de pós-doutoramento no Instituto de Magnetismo De Rocha da Universidade de Minnesota, nos Estados Unidos.

Em andamento

Dr. Luiz Guilherme Costa Melo

Laboratório de Materiais Magnéticos (LMM)

Supervisor: Prof. Dr. Antônio Domingues dos Santos

Título do Projeto: Estudos Magnéticos de Fio, Fitas e Filmes Finos de Alta Permeabilidade, em Dimensões (Sub)Microscópicas e Altas Freqüências

Bolsa FAPESP - Proc. n° 02/14084-7

Processo USP n° 2003.1.31818.1.8

Primeira Vigência: 1° de outubro de 2003 - 30 de setembro de 2004

Dr. Marcelo Ferreira da Silva

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Supervisor: Prof. Dr. Antônio José Roque da Silva

Título do Projeto: Estudo Sistemático da Influência do Funcional de Troca e Correlação Meta-GGA em Sistemas Moleculares e Sólidos.

Bolsa FAPESP - Proc. n° 02/14010-3

Processo USP n° 2003.1.15426.1.1

Primeira Vigência: 1° de maio de 2003 - 30 de abril de 2004

Dr. Maurice de Koning

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Supervisor: Prof. Dr. Adalberto Fazzio

Título do Projeto: Simulação Atomística de Propriedades Termodinâmicas e Cinéticas de Materiais Nanoestruturados.

Bolsa FAPESP - Proc. n° 03/01243-2

Processo USP n° 2003.1.23945.1.4

Primeira Vigência: 1° de julho de 2003 - 30 de junho de 2004

Dr. Júlio Antônio Nieri de Toledo Soares

Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS)

Supervisor: Prof. Dr. José Roberto Leite

Título do Projeto: Caracterização Óptica de Múltiplos Poços Quânticos de AL(Z)GA(1-Z)N/GAN Cúbico e de Filmes Finos de SCN

Bolsa FAPESP - Proc. n° 02/02335-5

Processo USP n° 2002.1.16259.1.0

Primeira Vigência: 1° maio de 2002 - 30 de abril de 2003

Segunda Vigência: 1° maio de 2003 - 30 de abril de 2004

Dra. Lara Kühl Teles

Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS)

Supervisor: Prof. Dr. José Roberto Leite

Nova Supervisora: Profa. Dra. Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

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

Segunda Vigência: 1° de junho de 2002 - 31 de maio de 2003

Terceira Vigência: 1° de junho de 2003 - 31 de maio de 2004

Dra. Luciana Kazumi Hanamoto

Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas (LESBT)

Supervisor: Prof. Dr. André Bohomoletz Henriques

Título do Projeto: Interações Eletrônicas em Compostos Epitaxiais III-V e IV-VI

Bolsa FAPESP - Proc. n° 02/00720-9

Processo USP n° 2002.1.16261.1.5

Primeira Vigência: 1° de maio de 2002 - 30 de abril de 2003

Segunda Vigência: 1° de maio de 2003 - 30 de abril de 2004

Dr. Neemias Alves de Lima

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Supervisora: Profa. Dra. Marília Junqueira Caldas

Título do Projeto: Estudo Teórico da Interação de Van-der-Waals:
Aplicação ao Polifenileno de Vinila
Bolsa FAPESP - Proc. nº 02/01259-3
Processo USP nº 2002.1.16260.1.9
Primeira Vigência: 1º de junho de 2002 - 31 de maio de 2003
Segunda Vigência: 1º de junho de 2003 - 31 de maio de 2004

Dr. Nilo Maurício Sotomayor Choque

Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS)
Supervisor: Prof. Dr. Guennadii M. Gusev
Título do Projeto: Transporte Eletrônico em Sistemas Mesoscópicos
Bolsa FAPESP - Proc. nº 02/05122-2
Processo USP nº 2002.1.28316.1.4
Primeira Vigência: 1º de outubro de 2002 - 30 de setembro de 2003
Segunda Vigência: 1º de outubro de 2003 - 30 de setembro de 2004

Dr. Ramon Valls Martin

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. nº 01/01895-4
Processo USP nº 2000.1.18222.1.6
Primeira Vigência: 1º maio de 2001 - 30 de abril de 2002
Segunda Vigência: 1º maio de 2002 - 30 de abril de 2003
Terceira Vigência: 1º maio de 2003 - 30 de abril de 2004

Dr. Roberto Rivelino de Melo Moreno

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais
Supervisor: Prof. Dr. Sylvio Roberto Accioly Canuto
Título do Projeto: Estudo Teórico de Estruturas e
Processos Moleculares: de Agregados a Líquidos
Bolsa FAPESP - Proc. nº 03/12695-9
Processo USP nº 2003.1.13074.1.0
Primeira Vigência: 1º de abril de 2003 - 31 de março de 2004

Dra. Sara Cristina P. Rodrigues

Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS)
Supervisor: Prof. Dr. José Roberto Leite
Título do Projeto: Propriedades Eletrônicas e Óticas de
Nanoestruturas de Semicondutores Magnéticos Diluídos (III, Mn) V
Bolsa FAPESP - Proc. nº 02/09268-1
Processo USP nº 2003.1.3617.1.1
Primeira Vigência: 1º dezembro de 2002 - 30 de novembro de 2003
Segunda Vigência: 1º dezembro de 2003 - 30 de novembro de 2004

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. n° 00/00564-1

Processo USP n° 2000.1.9398.1.7

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

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

Terceira Vigência: 1° de abril de 2002 - 31 de março de 2003

Quarta Vigência: 1° de abril de 2003 - 31 de março de 2004

Dr. Wanderlã Luis Scopel

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Supervisor: Prof. Dr. Adalberto Fazzio

Título do Projeto: Estudo de Processos na Interface Si/SiO₂ e de Estruturas de Si em Matrizes de SiO₂.

Bolsa FAPESP - Proc. n° 02/09226-7

Processo USP n° 2003.1.3570.1.5

Primeira Vigência: 1° de dezembro de 2002 - 30 de novembro de 2003

Segunda Vigência: 1° de dezembro de 2003 - 30 de novembro de 2004

Cancelamento a partir de agosto de 2004.

2h - Doutorados:

Concluídos:

“A Natureza de Defeitos em Bulk e em Superfície de Semicondutores”

Gustavo Martini Dalpian

Financiadora: FAPESP

Orientador: Adalberto Fazzio

Data: 11.08.2003

“Estudo das Ligas Quaternárias Al-Fe-Si-B Produzidas por Mecanossíntese”

Denis Rezende de Jesus

Financiadora: CNPq

Orientadora: Carmen Silvia de Moya Partiti

Data: 22.04.2003

“Transporte Quântico em Poços Parabólicos Largos”

Cássio Sanguini Sérgio

Financiadora: FAPESP

Orientador: Guennadii M. Gusev

Data: 25.07.2003

“Impurezas de Metais de Transição 3d em SiC: Cálculos de Primeiros Princípios”

Karina de Oliveira Barbosa
Financiadora: CNPq
Orientadora: Lucy Vitória Credidio Assali
Data: 12.02.2003

“Efeitos de Ligações de Hidrogênio em Propriedades de Aglomerados e de Líquidos Moleculares”

Roberto Rivelino de Melo Moreno
Financiadora: CNPq
Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto
Data: 17.02.2003

Em Andamento:

“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

“Exchange Bias e Relaxação em Bicamadas Magnéticas”

Ângela Dayana Barra Barrera

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 Materiais Magnéticos em Escala Micro e Nanoscópica através do SNOM-MO”

Mariana Pojar

Fonte Financiadora: CAPES

Orientador: Antônio Domingues dos Santos

“Análise Teórica de Nano-fios Semicondutores”

Cedric Rocha Leão

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Antônio José Roque da Silva

“Adsorção de O_2 em Nanotubos de Carbono e Propriedades de Sólidos de Fullerenos”

Ivana Zanella da Silva

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Antônio José Roque da Silva

“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

“Caracterização Óptica de Heteroestruturas Semicondutoras”

Marcos Frizzarini
Fonte Financiadora: sem bolsa
Orientadora: Euzi Conceição Fernandes da Silva

“Propriedades Magnéticas dos Compostos Pseudo binários de Laves Nb[Fe(1-x)Cr(x)]₂ e Hf[Fe(1-x)Cr(x)]₂”

Rafael Alejandro Cajacuri Merino
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Hercílio Rodolfo Rechenberg

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

Regina Keiko Murakami
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 de Poços Quânticos de AlGaIn/GaN”

Ángela Maria Ortiz de Zevallos Marquez
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: José Roberto Leite

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

David Gregório Pacheco Salazar
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: José Roberto Leite

“Propriedades Ópticas dos Nitretos GaN, InGaIn e AlGaIn na Estrutura Cúbica”

Odille Cué Noriega
Fonte Financiadora: FAPESP
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 Estruturais, Termodinâmicas e Eletrônicas de Ligas Quaternárias de Nitretos do Grupo-III”

Marcelo Marques

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientadora: Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

“Modelagem Teórica de Estados Ionizados em Complexos de Silício”

Henady Malahenko Júnior

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientadora: Marília Junqueira Caldas

“Mecanismo de Transporte em Polímeros Orgânicos Conjugados”

Liliana Yolanda Ancalla Dávila

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientadora: Marília Junqueira Caldas

“Estudo das Propriedades Intergranulares de Bi-2223”

Ernesto Govea-Alcaide (estagiário)

Fonte Financiadora: CAPES (Brasil-Cuba)

Orientador: Renato de Figueiredo Jardim

“Propriedades Intergranulares de Manganitas”

Alessandro de Souza Carneiro

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 Estruturais e Eletrônicas de Moléculas em Meio Líquido”

Eudes Eterno Fileti

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

“Estudos Ab Initio de Espectroscopia Molecular”

Valdemir Eneas 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

2i - Mestrados:

Concluídos:

“Estudo Sistemático da Adsorção de Átomos de Au em Nanotubos de Carbono”

José Carrijo de Faria Jr
Financiadora: FAPESP
Orientador: Adalberto Fazzio
Data: 15.05.2003

“Espectroscopia Mössbauer Aplicada ao Estudo de Minerais”

Daniel Ribeiro Franco
Financiadora: FAPESP
Orientadora: Carmen Silvia de Moya Partiti
Data: 29.08.2003

“Estudo da Superfície Au(111) e da Absorção de CH₃S em Au(111) através do Método PAW”

Andrei Reyes Huamantínco
Financiadora: FAPESP
Orientadora: Helena Maria Petrilli
Data: 23.09.2003

“Propriedades Físicas de Impurezas de Níquel em Diamante”

Rolando Larico Mamani
Financiadora: CNPq
Orientadora: Lucy Vitória Credídio Assali
Data: 11.11.2003

“Instalação Criogênica de uma antena gravitacional de baixíssima temperatura”

Sérgio Turano de Souza
Financiadora: CNPq
Orientador: Nei Fernandes de Oliveira Jr
Data: 03.10.2003

Em Andamento:

“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

“Adsorção de Moléculas de Oxigênio em CdTe (110)”

Ferenc Diniz Kiss

Fonte Financiadora: CAPES

Orientador: Armando Corbani Ferraz

“Passivação em Compostos Semicondutores III-V”

Sandro Inácio de Souza

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Armando Corbani Ferraz

“Espectroscopia Mössbauer de Sedimentos do Rio Casqueiro, Cubatão: Um Estudo do Magnetismo Ambiental”

Fábio de Oliveira Jorge

Fonte Financiadora: sem bolsa

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 um Gás Bidimensional de Elétrons Confinados nas Proximidades de Pontos Quânticos utilizando Medidas do Efeito Shubnikov de Haas, do Efeito Hall e Fotoluminescência”

Ivan Ramos Pagnossin

Fonte Financiadora: FAPESP

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

“Propriedades Magnéticas em Nanopartículas de Óxidos γFeO_3 e Fe_3O_4 ”

Waldir Leles Martins Filho

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Gerardo Fabián Goya

“Interação de Quadrupolo Nuclear em Complexos Envolvendo Metais”

Sandro Pereira Vilela

Fonte Financiadora: CNPq

Orientadora: Helena Maria Petrilli

“Estruturas e Transições Magnéticas em Compostos Intermetálicos de Terras Raras: Um Modelamento Teórico”

Thiago Barros Martins

Fonte Financiadora: CNPq

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 Estruturais e Eletrônicas do Óxido SrTiO₃”

Joelson Cott Garcia

Fonte Financiadora: CAPES

Orientadora: Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

“Modelos para Automontagem de Moléculas em Superfícies”

Alexandre Martins Mélo

Fonte Financiadora: CNPq

Orientadora: Marília Junqueira Calda

“Interações Cristalinas em Oligômeros de Tiofeno”

Benedito Maurício da Silva

Fonte Financiadora: CNPq

Orientadora: Marília Junqueira Calda

“Transporte Eletrônico em Multicanais Desordenados”

Marcelo Maia Garcia

Financiadora: CNPq

Orientadora: Marília Junqueira Caldas

“Controle Microestrutural e Magneto Resistência Intergranular em Manganitas La_{0,7-x}Y_x Cq_{0,3}M_nO₃ (0.0 \underline{L} x \underline{L} 0.5)”

José Antônio Souza

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Renato de Figueiredo Jardim

“Preparação e Caracterização de Manganitas (La, Pr) CaMnO”

Sueli Hatsumi Masunaga

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Renato de Figueiredo Jardim

“Estudo de Propriedades Estruturais e Eletrônicas de Piridina em Solução Aquosa”

Thaciana Valentina Malaspina Fileti

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

2j - Projetos de Iniciação Científica:

“Preparação e Caracterização de Pontas para um Microscópio Óptico de Varredura em Campo Próximo”

Mariana Rossi Carvalho

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientador: Antônio Domingues dos Santos

Ano: 2003

“Estudo da Difusão de Au e O₂ em Nanotubos de Carbono utilizando o Método de Monte Carlo Cinético”

Mariana Rossi Carvalho

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientador: Antônio José Roque da Silva

Ano: 2003

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

Fábio Oliveira Jorge

Fonte Financiadora: sem bolsa

Orientadora: Carmen Sílvia de Moya Partiti

Ano: até janeiro de 2003

“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: 2003

“Um Estudo de Dinâmica de Monte Carlos: Difusão em Meio Condensado”

Marcel Henrique Toniolo Galina

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientadora: Helena Maria Petrilli

Ano: 2003

“Pontos Quânticos Auto-organizados em Ligas Semicondutoras”

Renato de Carvalho

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientador: José Roberto Leite

Ano: 2003

“Propriedades Mecânicas e Eletrônicas de Nanofios Semicondutores: uma Abordagem Teórica”

Rafael Dias Menezes

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientadora: Lucy Vitória Credídio Assali

Ano: 2003

“Estudo Teórico de Modificações Estruturais em Materiais Semicondutores em Presença de Campo Elétrico Externo”

Marcos Aurélio Poles de Souza

Fonte Financiadora: sem bolsa

Orientadora: Lucy Vitória Credídio Assali

Ano: 2003

“Propriedades Eletrônicas de Poços Quânticos de GaN/In_xGa_{1-x}/GaN na Fase Cúbica”

Jefferson Gomes da Silva

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientadora: Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Ano: 2003

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

Tiago Ezequiel Corrêa (cancelamento em 23.04.2003)

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientadora: Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Ano: 2003

“Estudo de Dinâmica Molecular Aplicado ao Problema da Difusão de Impurezas”

Rodrigo Ramos da Silva

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientadora: Marília Junqueira Caldas

Ano: 2003

“Montagem e Calibração de uma Célula para Medidas de Transporte sob Pressão”

Solange de Andrade

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Renato de Figueiredo Jardim

Ano: 2003

“Propriedades Eletrônicas de Líquidos Moleculares”

Reynaldo Matos Hortensi

Financiadora: CNPq

Orientadora: Sylvio Roberto Accioly Canuto

Ano: 2003

3 - ATIVIDADES DE EXTENSÃO E GESTÃO ACADÊMICA

3a - Atividades Administrativas Institucionais:

Adalberto Fazzio

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.

Membro Eleito do Conselho da SBF (mandato: de 2001 a 2005).

Presidente da Sociedade Brasileira de Física (mandato: de julho de 2003 a julho de 2005).

André Bohomoletz Henriques

Membro do Conselho do Departamento (mandatos: de 21.09.2001 a 20.09.2003 e de 08.10.2003 a 07.10.2005).

Antônio Domingues dos Santos

Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 08.10.2003 a 07.10.2005).

Presidente da Comissão de Avaliação de Disciplinas do IFUSP.

Membro da Congregação do IFUSP (mandato: de 18.06.2003 a 17.05.2005).

Representante do Departamento junto à Comissão de Recursos Humanos (mandato: de 22.10.2002 a 21.10.2004).

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 do Conselho do Departamento (mandato: de 12.03.2003 a 11.03.2005).

Representante Suplente do Departamento junto à Comissão de Biblioteca do IFUSP (mandato: 29.06.2002 a 28.06.2004).

Representante Suplente do Departamento junto à Comissão de Pesquisa do IFUSP (mandato: 22.11.2003 a 21.11.2005).

Armando Corbani Ferraz

Coordenador da Câmara de Avaliação da Pró-Reitoria de Pós-Graduação da USP (a partir de 10.04.2000).

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: 09.12.2001 a 08.12.2003 e de 09.12.2003 a 08.12.2005).

Presidente da Comissão de Pós-Graduação do IFUSP (mandatos: mandatos: 09.12.2001 a 08.12.2003 e de 09.12.2003 a 08.12.2005).

Suplente da Pró-Reitora de Pós-Graduação da USP (a partir de 10.02.2002).

Armando Paduan Filho

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

Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 08.10.2003 a 07.10.2005).

Membro Suplente da Congregação do IFUSP (mandato: de 18.06.2003 a 17.05.2005).

Representante do Departamento junto à Comissão de Consultorias e Convênios (mandato: de 29.03.2001 a 28.03.2003).

Representante Suplente do Departamento junto à Comissão de Consultorias e Convênios (mandato: de 29.03.2003 a 28.03.2005).

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).

Carmen Silvia de Moya Partiti

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

Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 03.03.2001 a 02.03.2003).

Membro Suplente Congregação do IFUSP (mandato: de 18.06.2003 a 17.05.2005).

Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 12.03.2003 a 11.03.2005).

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).

Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 12.03.2003 a 11.03.2005).

Representante Suplente do Departamento junto à Comissão de Segurança do IFUSP (mandato: a partir de 07.06.2002).

Ewout Ter Haar

Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 12.03.2003 a 11.03.2005).

Representante do Departamento junto à Comissão de Recursos Humanos (mandato: de 22.10.2002 a 21.10.2004).

Gerardo Fabián Goya

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

Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 12.03.2003 a 11.03.2005).

Guennadii Michailovich Gusev

Representante do Departamento junto à Comissão de Biblioteca do IFUSP (mandato: 29.06.2002 a 28.06.2004).

Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 21.09.2001 a 20.09.2003 e de e de 08.10.2003 a 07.10.2005).

Helena Maria Petrilli

Coordenadora do “Journal Club do Grupo Teórico do DFMT (período: de agosto de 2002 a julho de 2003).

Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 21.09.2001 a 20.09.2003 e de 08.10.2003 a 07.10.2005).

Membro da Congregação do IFUSP (mandato: de 18.06.2003 a 17.05.2005).

Representante do Departamento junto à Comissão de Segurança do IFUSP (mandato: a partir de 07.06.2002).

Representante do Departamento junto à Comissão de Consultorias e Convênios (mandato: de 29.03.2003 a 28.03.2005).

Hercílio Rodolfo Rechenberg

Chefe do Departamento (mandato: de 23.02.2002 a 22.02.2004).

Membro da Congregação do IFUSP.

Membro do Conselho do Departamento.

Membro do Conselho Técnico Administrativo do IFUSP (mandato: de 23.02.2002 a 22.02.2004).

José Roberto Leite

Diretor de Programas Horizontais e Instrumentais do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e do Ministério da Ciência e Tecnologia (MCT) (mandato: a partir de 2003).

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 (mandato: 30.08.2001 a 29.08.2003).

Kazunori Watari

Coordenador da Sala Pró-Aluno do IFUSP.

Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 12.03.2003 a 11.03.2005).

Membro do Conselho do Departamento, a partir de 05.11.2003 (mandato: de 12.03.2003 a 11.03.2005).

Representante do Departamento junto à Comissão de Informática do IFUSP (mandatos: 22.08.2001 a 21.08.2003 e de 22.08.2003 a 21.08.2005).

Lucy Vitória Credidio Assali

Coordenadora do “Journal Club do Grupo Teórico do DFMT (período: a partir de julho de 2003).

Membro da Comissão Coordenadora do Programa de Aperfeiçoamento de Ensino do IFUSP - PAE (mandato: de 25.11.2002 a 24.11.2005).

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

Membro do Conselho do Departamento (mandatos: de 21.09.2001 a 20.09.2003 e de 08.10.2003 a 07.10.2005).

Representante da Comissão de Graduação do IFUSP junto à Comissão de Avaliação de Disciplinas (CAD) (mandato: de 15.05.2003 a 14.05.2004).

Suplente do Representante do Departamento junto à Comissão de Graduação do IFUSP (mandato: 25.11.2002 a 24.11.2005).

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 03.03.2001 a 02.03.2003).

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

Marília Junqueira Caldas

Membro da Congregação do IFUSP.

Membro do Conselho do Departamento.

Representante do IFUSP junto ao Centro Interunidades de História da Ciência (a partir de janeiro de 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 23.02.2002 a 22.02.2004).

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 08.10.2003 a 07.10.2005).

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

Presidente da Comissão de Graduação do IFUSP (mandato: de 29.03.2003 a 28.03.2005).

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Membro da Congregação do IFUSP.

Membro do Conselho do Departamento.

Membro Titular do Conselho da Sociedade Brasileira de Física.

Representante do Departamento junto à Comissão de Pesquisa do IFUSP (mandato: 22.11.2003 a 21.11.2005).

Valdir Bindilatti

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).

Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 08.10.2003 a 07.10.2005).

Representante Suplente do Departamento junto à Comissão de Informática do IFUSP (mandatos: de 22.08.2001 a 21.08.2003 e de 22.08.2003 a 21.08.2005).

Representante Suplente do Departamento junto à Comissão de Pesquisa do IFUSP (mandato: de 22.11.2001 a 21.11.2003).

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

Adalberto Fazzio

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

Atuação como Árbitro: Revista Brasileira de Física, Physical Review B + Physical Review Letter, 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, 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 International Journal of Modern Physics B, Physical Review Letters e Physical Review B.

Armando Corbani Ferraz

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

Atuação como Árbitro: Applied Surface Science, Brazilian Journal of Physics, International Journal of Quantum Chemistry, Journal of Physics: Condensed Matter, Physical Review B, Solid State Communications, Surface Science, Physical Review Letters, Journal of Chemical Physics e Journal of Physical Chemistry B.

Armando Paduan Filho

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.
Arbitragem para: Journal of Magnetism and Magnetic Materials - JMMM 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 - JMMM.

Euzi Conceição Fernandes da Silva

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

Guennadii Michailovich Gusev

Assessoria científica prestada: FAPESP e CNPq.
Consultoria para: Physical Review B.

Helena Maria Petrilli

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, CNPq ANPCyT (Argentina).
Arbitragem para: Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 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 e UNIP.

Gerardo Fabián Goya

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP.
Arbitragem para: Physica B, Journal of Magnetism and Magnetic Materials - JMMM, Physica Statu Solidi, Journal of Solid State Chemistry, Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials, Material Science Fórum, Brazilian Journal of Physics e Materials Letters.

José Roberto Leite

Assessoria científica prestada: 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: Physical Review, Physical Review Letters, Solid State Commun., Applied Physics Letters, Modern Physics Letters B, International Journal of Modern Physics B, Brazilian Journal of Physics, Physica Status Solidi, Revista Estudos Arte/Tecnologia (PUC/GO), etc.

Lucy Vitória Credidio Assali

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.

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

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.

Arbitragem para: Journal Physics Condensed Matter, Journal of Applied Physics, International Journal of Modern Physics B, Applied Physics Letters, Nanotechnology, Physica Status Solidi, Brazilian Journal of Physics, Modern Physics Letters B, Physical Review Letters, Physical Review B, Physica B, Physica E, Semicond. Science and Technology e Superlattices and Microst.

Marília Junqueira Caldas

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, CNPq, CAPES, MURST/Cofin – Ministero dell'Università e della Ricerca Scientifica e Tecnologica (Cofinanziamento Universitario).

Arbitragem para: Physical Review B e Solid State Communications.

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, FINEP, 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 - JMMM, Material Letters, 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 e CNPq.

Arbitragem para: Physical Review B e Physical Review Letters.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

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

Arbitragem para: International Journal of 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 Physical Chemistry A e B, Journal of the American Chemical Society, Journal of the Chemical Society (Perkins Transaction), Journal of the Brazilian Chemical Society, Computer Physics Communications, Revista Brasileira de Ensino de Física e Chemical Physics Letters.

Valdir Bindilatti

Assessoria prestada: FAPESP e CNPq.

Arbitragem para: Physica Status Solidi e Journal of Magnetism and Magnetic Materials - JMMM.

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

Adalberto Fazzio

"Nanociência no Brasil" - Palestra, 1ª Mostra do Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal de Uberlândia, Faculdade de Física, Uberlândia, MG (13 de agosto de 2003).

"Nanotubos de Carbono na Superfície Si(100) e Nanofios de Ouro" - Seminário, Universidade Estadual Paulista, Bauru, SP (11 de junho de 2003).

"Natureza do Manganês em Semicondutores" - Palestra, XXI Encontro de Físicos do Norte e Nordeste, Fortaleza, CE (03 a 07 de novembro de 2003).

"Política Científica e as Atividades da Sociedade Brasileira de Física" - Palestra, XX Semana da Física, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, GO (20 a 23 de outubro de 2003).

"Simulação Computacional de Materiais Nanoestruturados" - Colóquio, Universidade Federal de Uberlândia, Departamento de Física, Uberlândia, MG (09 de janeiro de 2003).

"Simulação Computacional: Nanofios de Ouro e Nanotubos de Carbono" - Seminário, Universidade Federal do Espírito Santo, Centro de Ciências Exatas, Departamento de Física, Vitória, ES (05 de junho de 2003).

"Simulações Computacionais em Materiais: Nanotubos de Carbono e Nanofios de Ouro" - Palestra, Universidade Estadual de Maringá, Maringá, PR (03 de novembro de 2003).

André Bohomoletz Henriques

"Propriedades Eletrônicas de Super-Redes Degeneradas Tipo I e Tipo II" - Seminário, Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP (23 de setembro de 2003).

Armando Corbani Ferraz

"A Pós-Graduação do IFUSP" - Colóquio, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (05 de junho de 2003).

Gerardo Fabián Goya

"Efeito das Interações Dipolares no Estado Ordenado em Nanopartículas Magnéticas: Superparamagnetismo e Vidro de Spin" - Palestra Convidada, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC (17 de outubro de 2003).

"Magnetic Interactions in Ball-Milled Spinel Ferrites" - Keynote Lecture, 4th International Conference on Mechanochemistry and Mechanical Alloying (4th INCOME 2003), Braunschweig, Alemanha (setembro de 2003).

"Dipolar Interactions Between Magnetite Nanoparticles in Frozen Ferrofluids and Ferronematics", Invited talk, II Workshop on Metastable and Nanostructured Materials (NanoMat 2003), Foz do Iguaçu, Paraná (28 e 29 de agosto de 2003).

Helena Maria Petrilli

"Novos Materiais" - Centro de Extensão Universitária, São Paulo, SP (06 de outubro 2003).

"Hyperfine Interactions: Contributions from Ab Initio Calculations" - Seminário, Technische Universität Clausthal, Clausthal-Zellerfeld, Alemanha (18 de novembro 2003).

Lucy Vitória Credidio Assali

"Propriedades Eletrônicas de Impurezas em Semicondutores" - Seminário, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, Departamento de Física Aplicada, Laboratório de Cristalografia (20 de novembro 2003).

"1^o Seminário Internacional de Avaliação de Graduação e da Pós-Graduação e 5^o Seminário Nacional de Avaliação da Graduação promovido pelas Pró-Reitorias de Graduação e Pós-Graduação", Universidade de São Paulo, São Paulo, SP (28 de novembro de 2003).

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

"Phase Separation and Ordering in Group-III Nitride Alloys" - Invited Talk, 11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics, Fortaleza, CE (9 a 14 de março de 2003).

"Effects of Biaxial Strain on Cubic $\text{In}(x)\text{Ga}(1-x)\text{N}$ Alloys and Ordered Phase Formations and Ab initio Calculations of Structural Properties of Zinc Blend Quaternary $\text{Al}(x)\text{Ga}(y)\text{In}(1-x-y)\text{N}$ alloys" - Invited Talk, III- Ibero American Workshop on Nanostructures for Application, Madrid, Espanha (24 a 28 de março de 2003).

Marília Junqueira Caldas

"Efeitos do Arranjo Intercadeias sobre Luminescência de PPV: Teoria", Palestra, II Encontro de Trabalho do Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos, Nazaré Paulista, SP (13 a 16 de abril 2003).

"First-Principles Analysis of Optoelectronic Properties in Semiconducting Polymers: The role of solid state packing", Palestra, II Encontro da Sociedade Brasileira de Pesquisa em Materiais - SBPMat, Rio de Janeiro, RJ (28 de outubro de 2003).

"A Ótica de Polímeros sob a Ótica Teórica" - Colóquio, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, Departamento de Física e Informática, São Carlos, SP (28 de novembro de 2003).

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

"Progresso e Perspectivas da Astronomia Gravitacional para o Século XXI" - Mesa-Redonda, XXIX Reunião da Sociedade Astronômica Brasileira, São Pedro, SP (07 e 08 de agosto de 2003).

"Aplicações: Detectores de Ondas Gravitacionais" - Aula, IV Escola Brasileira de Magnetismo Jorge André Swieca EBM 2003 - São Carlos, SP (24 e 25 de novembro de 2003).

Renato de Figueiredo Jardim

"Magnetoresistência em Manganitas" - Colóquio, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Carlos, SP (21 de novembro de 2003).

Sylvio Roberto Accioly Canuto

"Contribuição das Ligações de Hidrogênio para o Equilíbrio Conformacional do Furfural em Água" - Seminário, Universidade de Coimbra, Portugal (20 de janeiro de 2003).

"Hydrogen Bonds in Explicit Aqueous Environment" - Seminário, Universidade de Uppsala, Suécia (outubro de 2003).

"Monte Carlo Modeling of Molecules and Biomolecules in the Liquid Environment", Palestra ("Invited Talk"), III Brazilian Meeting on Simulational Physics, Ouro Preto, MG (13 de agosto de 2003).

"Simulação Computacional de Líquidos. Propriedades Eletrônicas" - Invited Speaker, III Brazilian Meeting on Simulational Physics, Ouro Preto, MG (13 a 15 de agosto de 2003).

"Simulação Computacional de Moléculas e Biomoléculas" - Curso de Verão, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (05 a 07 de fevereiro de 2003).

"Simulação Computacional de Moléculas e Biomoléculas em Meio Líquido. Um Tratamento Estatístico-Quântico" - Colóquio, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR, (05 de junho de 2003).

"Solvents as Explicit Liquids using a Sequential Monte Carlo-Quantum Mechanics Methodology" - Seminário, 43th Sanibel Symposium, em St. Augustine, Florida, EUA (28 de fevereiro de 2003).

3d – Participação de Docentes em Concursos no IFUSP como Candidatos:

PROCESSO SELETIVO PARA A CONTRATAÇÃO DE UM DOCENTE NA CATEGORIA DE PROFESSOR DOUTOR, REF. MS-3, EM REGIME DE TURNO COMPLETO, JUNTO AO DEPARTAMENTO DE FÍSICA DOS MATERIAIS E MECÂNICA (Edital IF 04/03)

1. Candidato: Dr. Valmir Antônio Chitta

Banca:

Carlos Castilla Becerra (Presidente)
Mário José de Oliveira
Ricardo Magnus Osório Galvão

Período: de 22 a 23.04.2003

Homologação: 22.05.2003

PROCESSO SELETIVO PARA A CONTRATAÇÃO DE UM DOCENTE NA CATEGORIA DE AUXILIAR DE ENSINO, REF. MS-1, EM REGIME DE TURNO COMPLETO, JUNTO AO DEPARTAMENTO DE FÍSICA DOS MATERIAIS E MECÂNICA (Edital IF 49/03)

(contratação de um docente na categoria de Auxiliar de Ensino, Ref. MS-1, em Regime de Turno Completo, junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica)

Obs.: enquanto perdurar o Afastamento do Prof. Dr. José Roberto Leite, sem prejuízos dos vencimentos e das demais vantagens do cargo.

1. Candidato: Dr. Valmir Antônio Chitta

Banca:

Nei Fernandes de Oliveira Jr. (Presidente)

Elisabeth Andreoli de Oliveira

Walter Maigon Pontuschka

Período: de 08 a 09.12.2003

Homologação: 19.02.2004

CONCURSO DE LIVRE-DOCÊNCIA

1. Candidato: Prof. Dr. Antônio José Roque da Silva

Disciplinas:

Introdução à Física do Estado Sólido I (FMT814)

Introdução à Física do Estado Sólido II (FMT835)

Banca:

Belita Koiller (IF-UFRJ)

Fernando Lázaro Freire Jr. (PUC-RJ)

Lidério Citrângulo Ioriatti Jr. (IF-USP-São Carlos)

Luiz Guimarães Ferreira (IFUSP)

Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP) (Presidente)

Período: de 24 a 26.09.2003

Homologação: 31.10.2003

CONCURSO PÚBLICO PARA O PROVIMENTO DE UM CARGO DE PROFESSOR DOUTOR, REF. MS-3, EM RDIDP, JUNTO AO DEPARTAMENTO DE FÍSICA DOS MATERIAIS E MECÂNICA (Edital IF 015/03)

Candidata: Profa. Dra. Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Banca:

Antônio Martins Figueiredo Neto (IFUSP)

Armando Corbani Ferraz (IFUSP)

Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP)
Josif Frenkel (IFUSP)
Otaviano Augusto Marcondes Helene (IFUSP)

Período: de 24 a 25.11.2003

Homologação: 23.12.2003

CONCURSO PÚBLICO PARA O PROVIMENTO DE UM CARGO DE PROFESSOR DOUTOR, REF. MS-3, EM RDIDP, JUNTO AO DEPARTAMENTO DE FÍSICA DOS MATERIAIS E MECÂNICA (Edital IF 016/03)

Candidato: Prof. Dr. Guennadii Michailovich Gusev

Banca:

Antônio Martins Figueiredo Neto (IFUSP)
Armando Corbani Ferraz (IFUSP)
Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP)
Josif Frenkel (IFUSP)
Otaviano Augusto Marcondes Helene (IFUSP)

Período: de 24 a 25.11.2003

Homologação: 23.12.2003

3e - Participação em Comissões Julgadoras no IFUSP:

Adalberto Fazio

Roberto Rivelino de Melo (Tese de Doutorado).

Título: “Efeitos de Ligações de Hidrogênio em Propriedades de Aglomerados e de Líquidos Moleculares”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Sylvio Roberto Accioly Canuto (orientador), Adalberto Fazio (IFUSP), Paulo Sérgio Santos (IQUSP), Ricardo Bicca de Alencastro (UFRJ) e Márcia Cristina Bernardes Barbosa (UFRGS).

Data: 17 de fevereiro de 2003.

José Carrijo de Faria Júnior (Dissertação de Mestrado).

Título: “Estudo Sistemático da Adsorção de Átomos de Au em Nanotubos de Carbono”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (orientador) (IFUSP), Antônio Domingues dos Santos (IFUSP), Roberto Hiroki Miwa (UFU).

Data: 15 de maio de 2003.

Gustavo Martini Dalpian (Tese de Doutorado).

Título: “A Natureza de Defeitos em Bulk e em Superfície de Semicondutores”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (orientador) (IFUSP), Gilberto Medeiros Ribeiro (LNLS), Guennadii Michailovich Goussev (IFUSP), Ricardo Wagner Nunes (UFMG) e Wagner N. Rodrigues (UFMG).

Data: 11 de agosto de 2003.

Antônio Domingues dos Santos

Fábio Furlan Ferreira (Tese de Doutorado).

Título: “Eletrocromismo em Filmes Finos Compósitos”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Márcia Carvalho de Abreu Fantini (orientadora), Antônio Domingues dos Santos (IFUSP), Manfredo Harri Tabacniks (IFUSP), Mônica Alonso Cotta (UNICAMP) e Jair Scarmínio (UEL).

Data: 07 de fevereiro de 2003.

José Carrijo de Faria Júnior (Dissertação de Mestrado).

Título: “Estudo Sistemático da Adsorção de Átomos de Au em Nanotubos de Carbono”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (orientador) (IFUSP), Antônio Domingues dos Santos (IFUSP), Roberto Hiroki Miwa (UFU).

Data: 15 de maio de 2003.

Antônio José Roque da Silva

Gabriel Oliveira Sawakuchi (Dissertação de Doutorado).

Título: “Elucidando a Genese da Cor do Quartzo Irradiado”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio José Roque da Silva, Emico Oluno (orientadora) (IFUSP), Piotr Trzesniak (UNIFEI)

Data: 16 de dezembro de 2003.

Armando Corbani Ferraz

Concurso Público de Provas e Títulos para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor, Ref. MS-3, em RDIDP, junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica do Instituto de Física da Universidade de São Paulo.

Inscrito: Prof. Dr. Alain André Quivy.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Martins Figueiredo Neto (IFUSP), Armando Corbani Ferraz (IFUSP), Elisabeth Andreoli de Oliveira (IFUSP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP) e Josif Frenkel (presidente) (IFUSP).

Período: de 24 a 25 de novembro de 2003.

Concurso Público de Provas e Títulos para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor, Ref. MS-3, em RDIDP, junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica do Instituto de Física da Universidade de São Paulo.

Inscrito: Prof. Dr. Guennadii Michailovich Gusev.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Martins Figueiredo Neto(IFUSP), Armando Corbani Ferraz (IFUSP), Elisabeth Andreoli de Oliveira (IFUSP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP) e Josif Frenkel (presidente) (IFUSP).

Período: de 24 a 25 de novembro de 2003.

Concurso Público de Provas e Títulos para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor, Ref. MS-3, em RDIDP, junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica do Instituto de Física da Universidade de São Paulo.

Inscrita: Profa. Dra. Luísa Maria Ribeiro Scolfaro.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Martins Figueiredo Neto(IFUSP), Armando Corbani Ferraz (IFUSP), Elisabeth Andreoli de Oliveira (IFUSP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP) e Josif Frenkel (presidente) (IFUSP).

Período: de 24 a 25 de novembro de 2003.

Carlos Castilla Becerra

Processo Seletivo para a Contratação de um Docente, na Categoria de Professor Doutor, em Regime de Tempo Integral e Dedicção Exclusiva, junto ao Departamento de Física Geral (Edital 12/02/IF).

Candidatos Presentes: Dr. Luiz Anibal Diambra, Mário Noboru Tamashiro, Juan Pablo Neirotti, Alessandro Paulo Sérvio de Moura, Murilo da Silva Baptista, José Fernando Diniz Chubaci e João Alberto Mesquita Pereira.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Carlos Castilla Becerra, Francisco Castilho Alcaraz, Roland Köberle, Silvio Roberto de Azevedo Salinas e Marcus Aloísio Martinez Aguiar.

Período: de 17 a 18 de março de 2003.

Processo Seletivo para a Contratação de um Docente, na Categoria de Professor Doutor, em Regime de Turno Completo, junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica.

Candidato Inscrito: Dr. Valmir Antônio Chita.

Candidato Aprovado: Dr. Valmir Antônio Chita.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Carlos Castilla Becerra (presidente), Mário José de Oliveira e Ricardo Magnus Osório Galvão.

Período: de 22 a 23 de abril de 2003.

Carmen Silvia de Moya Partiti

Denis Rezende de Jesus (Tese de Doutorado)

Título: “Estudo das Ligas Quaternárias Al-Fe-Si-B Produzidas por Mecanossíntese”.

Comissão examinadora: Profs. Drs. Carlos Larica (UFES), Carmen Silvia de Moya Partiti (orientadora), Helena Maria Petrilli, Lívio Amaral (UFRGS) e Rosangela Itri.

Data: 22 de abril de 2003.

Euzi Conceição Fernandes da Silva

Cassio Sanguini Sergio (Tese de Doutorado).

Título: “Transporte Quântico em Poços Parabólicos Largos”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Guennadii Michailovich Goussev (orientador), Euzi Conceição Fernandes da Silva, Valdir Bindilatti, Fernando Iikawa (UNICAMP) e Monica Alonso Cotta (UNICAMP).

Data: 25 de julho de 2003.

Guennadii Michailovich Gusev

Cassio Sanguini Sergio (Tese de Doutorado).

Título: “Transporte Quântico em Poços Parabólicos Largos”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Guennadii Michailovich Goussev (orientador), Euzi Conceição Fernandes da Silva, Valdir Bindilatti, Fernando Iikawa (UNICAMP) e Monica Alonso Cotta (UNICAMP).

Data: 25 de julho de 2003.

Gustavo Martini Dalpian (Tese de Doutorado).

Título: “A Natureza de Defeitos em Bulk e em Superfície de Semicondutores”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (orientador) (IFUSP), Gilberto Medeiros Ribeiro (LNLS), Guennadii Michailovich Goussev (IFUSP), Ricardo Wagner Nunes (UFMG) e Wagner N. Rodrigues (UFMG).

Data: 11 de agosto de 2003.

Helena Maria Petrilli

Karina de Oliveira Barbosa (Tese de Doutorado).

Título: “Impurezas de Metais de Transição 3d em Sic: Cálculos de Primeiros Princípios”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Inês Pereyra Alvarez (EPUSP), Helena Maria Petrilli (IFUSP), Lucy Vitória Credidio Assali (orientadora), Márcia Carvalho de Abreu Fantini (IFUSP) e Rodrigo Barbosa Capaz (UFRJ).

Data: 12 de fevereiro de 2003.

Leila Thomazelli Thiegui (Tese de Doutorado).

Título: “Aplicação de Processos de Foto-Isomerização no Alinhamento de Cristais Líquidos”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Elisabeth Andreoli de Oliveira (orientadora), Helena Maria Petrilli (IFUSP), Luiz Roberto Evangelista (UEM), Osvaldo Novais de Oliveira Júnior (IF/SC/USP) e Yoshio Kawano (IQUSP).

Data: 13 de fevereiro de 2003.

Denis Rezende de Jesus (Tese de Doutorado).

Título: “Estudo das Ligas Quaternárias Al-Fe-Si-B Produzidas por Mecanossíntese”.

Comissão examinadora: Profs. Drs. Carlos Larica (UFES), Carmen Silvia de Moya Partiti (orientadora), Helena Maria Petrilli, Lívio Amaral (UFRGS) e Rosangela Itri.

Data: 22 de abril de 2003.

Andrei Reyes Huamantincó (Dissertação de Mestrado).

Título: “Estudo da superfície Au(111) e da absorção de CH₃S em Au(111) através do método PAW”.

Comissão examinadora: Profs. Drs. Helena Maria Petrilli (orientadora) (IFUSP), Sônia Frota-Pessôa (IFUSP) e Bernardo Laks (UNICAMP).

Data: 23 de setembro de 2003.

Hercílio Rodolfo Rechenberg

Sarah Isabel Pinto Monteiro do Nascimento Alves (Tese de Doutorado).

Título: “Termodifusão em Colóides Magnéticos: O Efeito Soret”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Martins Figueiredo Neto (orientador), Hercílio R. Rechenberg (IFUSP), José Américo de Miranda Neto (UFPE), Francisco Augusto Tourinho (UnB-Brasília) e Sérgio Carlos Zílio (IFSC-USP).

Data: 27 de novembro de 2003.

Concurso Público de Provas e Títulos para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor, Ref. MS-3, em RDIDP, junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica do Instituto de Física da Universidade de São Paulo.

Inscrito: Prof. Dr. Alain André Quivy.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Martins Figueiredo Neto (IFUSP), Armando Corbani Ferraz (IFUSP), Elisabeth Andreoli de Oliveira (IFUSP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP) e Josif Frenkel (presidente) (IFUSP).

Período: de 24 a 25 de novembro de 2003.

Concurso Público de Provas e Títulos para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor, Ref. MS-3, em RDIDP, junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica do Instituto de Física da Universidade de São Paulo.

Inscrito: Prof. Dr. Guennadii Michailovich Gusev.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Martins Figueiredo Neto (IFUSP), Armando Corbani Ferraz (IFUSP), Elisabeth Andreoli de Oliveira (IFUSP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP) e Josif Frenkel (presidente) (IFUSP).

Período: de 24 a 25 de novembro de 2003.

Concurso Público de Provas e Títulos para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor, Ref. MS-3, em RDIDP, junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica do Instituto de Física da Universidade de São Paulo.

Inscrita: Profa. Dra. Luísa Maria Ribeiro Scolfaro.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Martins Figueiredo Neto (IFUSP), Armando Corbani Ferraz (IFUSP), Elisabeth Andreoli de Oliveira (IFUSP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP) e Josif Frenkel (presidente) (IFUSP).

Período: de 24 a 25 de novembro de 2003.

José Roberto Leite

Regiane Aparecida Ragi Pereira (Tese de Doutorado).

Título: “Contribuições para a modelagem de Dispositivos Semicondutores Baseados em Contatos Schottky Heterodimensionais”.

Banca Examinadora: Profs. Drs. Murilo Araújo Romero (orientador), Antônio Martins Figueiredo Neto (IFUSP), José Roberto Leite (IFUSP), Antônio Carlos Seabra (EPUSP) e Jacobus Willibrordus Swart (UNICAMP).

Data: 21 de fevereiro de 2003.

Lucy Vitória Credidio Assali

Marcos Ronaldo Ramos de Oliveira (Dissertação de Mestrado).

Título: “Correntes de Despolarização Termicamente Estimuladas: Topázio e Vidros Soda-Lime”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Elisabeth Mateus Yoshimura (orientadora), Keizo Yukimitu (FEIS) e Lucy Vitória Credidio Assali (IFUSP).

Data: 16 de janeiro de 2003.

Karina de Oliveira Barbosa (Tese de Doutorado).

Título: “Impurezas de Metais de Transição 3d em SiC: Cálculos de Primeiros Princípios”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Inês Pereyra Alvarez (EPUSP), Helena Maria Petrilli (IFUSP), Lucy Vitória Credidio Assali (orientadora), Márcia Carvalho de Abreu Fantini (IFUSP) e Rodrigo Barbosa Capaz (UFRJ).

Data: 12 de fevereiro de 2003.

Banca Examinadora do Exame de Qualificação para o Doutorado da Comissão de Pós-Graduação do IFUSP.

Período: março de 2003.

Rolando Larico Mamani (Dissertação de Mestrado).

Título: “Propriedades Físicas de Impurezas de Níquel em Diamante”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Euzi Conceição Fernandes da Silva (IFUSP), Lucy Vitória Credidio Assali (orientadora) e Ronei Miotto (UnB-Brasília).

Data: 11 de novembro de 2003.

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

Sérgio Turano de Souza (Dissertação de Mestrado).

Título: “Instalação Criogênica de uma Antena Gravitacional de Baixíssima Temperatura”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Alain André Quivy (IFUSP), Anderson Campos Fauth (IFUNICAMP) e Nei Fernandes de Oliveira Jr. (orientador) (IFUSP).

Data: 03 de outubro de 2003.

Processo Seletivo para a Contratação de um Docente na Categoria de Auxiliar de Ensino, Ref. MS-1, em Regime de Turno Completo, junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica.

Inscrito: Dr. Valmir Antônio Chitta.

Aprovado: Dr. Valmir Antônio Chitta.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Elisabeth Andreoli de Oliveira (IFUSP), Nei Fernandes de Oliveira Jr. (presidente) (IFUSP) e Walter Maigon Pontuschka (IFUSP).

Período: de 08 a 09 de dezembro de 2003.

Renato de Figueiredo Jardim

Processo Seletivo para a Contratação de um Docente na Categoria de Auxiliar de Ensino, Ref. MS-1, em Regime de Turno Completo, junto ao Departamento de Física Aplicada.

Inscrito: Dr. Alexandre Lima Correia.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Ricardo Magnus Osório Galvão (IFUSP) (Presidente), Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP) e Vito Roberto Vanin (IFUSP).

Período: de 07 a 08 de maio de 2003.

Homologação: 22 de maio 2003

Processo Seletivo para a Contratação de um Docente na Categoria Auxiliar de Ensino, MS-1, em Regime de Turno Parcial, junto ao Departamento de Física Aplicada.

Inscritos: Dr. André Alves Ferreira, Dra. Andréa Dardes de Almeida Castanho e Dr. João Alberto Mesquita Pereira.

Aprovada: Dra. Andréa Dardes de Almeida Castanho

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP), Rosângela Itri (IFUSP) e Shigueo Watanabe (IFUSP)

Período: de 08 a 09 de dezembro de 2003.

Sônia Frota-Pessôa

Andrei Reyes Huamantincó (Dissertação de Mestrado).

Título: “Estudo da superfície Au(111) e da absorção de CH₃S em Au(111) através do método PAW”.

Comissão examinadora: Profs. Drs. Helena Maria Petrilli (orientadora) IFUSP), Sonia Frota Pessôa (IFUSP) e Bernardo Laks (UNICAMP).

Data: 23 de setembro de 2003.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Roberto Rivelino de Melo (Tese de Doutorado)

Título: “Efeitos de Ligações de Hidrogênio em Propriedades de Aglomerados e de Líquidos Moleculares”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Sylvio Roberto Accioly Canuto (orientador), Adalberto Fazzio (IFUSP), Paulo Sérgio Santos (IQUSP), Ricardo Bicca de Alencastro (UFRJ) e Márcia Cristina Bernardes Barbosa (UFRGS).

Data: 17 de fevereiro de 2003.

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

Inscrita: Profa. Dra. Elisabeth Mateus Yoshimura.

Comissão Julgadora: Amando Siuiti Ito (FFCL-Ribeirão Preto), Edwaldo Eduardo Camargo (IFUNICAMP), Odair Dias Gonçalves (IFUFRJ), Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP), Vito Roberto Vanin (IFUSP).

Período: de 08 a 10 de setembro de 2003.

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

Inscrito: Prof. Dr. Antônio José Roque da Silva.

Comissão Julgadora: Belita Loiler (IF-UFRJ), Fernando Lázaro Freire Jr. (PUC-RJ), Lidério Citrângulo Ioriatti Jr. (IFUSP-São Carlos), Luiz Guimarães Ferreira (IFUSP) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP) (presidente).

Valdir Bindilatti

Cassio Sanguini Sergio (Tese de Doutorado).

Título: “Transporte Quântico em Poços Parabólicos Largos”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Guennadii Michailovich Goussev (orientador), Euzi Conceição Fernandes da Silva, Valdir Bindilatti, Fernando Iikawa (UNICAMP) e Monica Alonso Cotta (UNICAMP).

Data: 25 de julho de 2003.

3f - Participação em Comissões Julgadoras em Outras Instituições:

Adalberto Fazzio

Simone Silva Alexandre (Tese de Doutorado - Departamento de Física da Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG).

Título: “Nanoestruturas por Primeiros Princípios”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), Hélio Chacham (UFMG) (orientador), Marcos Pimenta (UFMG), Oscar Nassif de Mesquita (UFMG) e Rodrigo Capaz (UFRJ).

Período: de 29 a 30 de janeiro de 2003.

Concurso de Livre-Docência junto ao Instituto de Física de São Carlos, USP, São Carlos, SP.

Inscrito: Prof. Dr. Guo-Qiang Hai.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Alor Silvério Chaves (UFMG), Belita Koiller (UFRJ), Eduardo Miranda (UNICAMP), Francisco Castilho Alcaraz (IFSC-USP) e José Roberto Leite (IFUSP).

Membro Suplente: Prof. Dr. Adalberto Fazzio (IFUSP): substituiu a Profa. Dra. Belita Koiller (UFRJ).

Período: de 06 a 07 de fevereiro de 2003.

Concurso para o Provimento de um Cargo de Professor Titular junto ao Instituto de Física da Universidade de Brasília, Brasília, DF.

Inscritos: Profs. Drs. Álvaro Ferraz Filho, Antônio Cleves Nunes Oliveira, Antônio Luciano de Almeida Fonseca, Fernando Albuquerque de Oliveira, Geraldo Magela e Silva, Joaquim José Soares Neto, José Wadih Maluf, Kleber Carlos Mundim, Marco Antônio Amato, Oleg Grigorievich Palev, Paulo César de Moraes, Tarcísio Marciano da Rocha Filho e Viktor Dodonov.

Indicado: Prof. Dr. Viktor Dodonov.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), José Roberto Leite (IFUSP), Ricardo Magnus Osório Galvão (IFUSP), Reinhardt Adolfo Fuck (Unb-Brasília) e Rubens Aldrovandi (UNESP).

Período: de 17 a 19 de março de 2003.

Cláudio Radtke (Tese de Doutorado - Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS).

Título: “Crescimento Termico de Filmes Dieletricos sobre SiC e Caracterização das Estruturas Formadas”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), Fernanda C. Stedile (IFUFRGS) (orientadora), Henri Ivanov Boudinov (IFUFRGS), Rita Maria Cunha de Almeida (IFUFRGS), Wagner Nunes Rodrigues (DF ICE UFMG).

Período: 29 de abril de 2003.

Concurso para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor junto ao Instituto de Física “Gleb Wataghin” da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

Inscritos: Drs. Abner de Siervo e Peter Hammer.

Indicado: não houve.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), Aldo Felix Craievich (IFUSP), Alex Antonelli (UNICAMP), Israel Jacob Rabin Baumvol (UFRGS) e Luiz Eduardo Moreira Carvalho de Oliveira (UNICAMP).

Período: de 20 a 21 de agosto de 2003.

Caetano Rodrigues Miranda (Tese de Doutorado - Instituto de Física “Gleb Wataghin” da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP).

Título “Da Ordem à Desordem: uma Visão da Ciência dos Materiais Computacional”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), Alex Antonelli (orientador) (IFUNICAMP), Antônio José Roque da Silva (IFUSP), Eduardo Miranda (IFUNICAMP) e Edison Zacarias da Silva (IFUNICAMP).

Data: 16 de setembro de 2003.

Antônio Domingues dos Santos

Silvete Coradi Guerini (Tese de Doutorado - Instituto de Física da Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, RS).

Título: “Descrição Estocástica do Efeito Barkhausen”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Domingues dos Santos (IFUSP), Celso da Silva (UFMS), Paulo César Piquini (UFMS) (orientador) e Rubem Sommer (UFMS).

Período: de 11 a 13 de março de 2003.

Antônio José Roque da Silva

Concurso para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor junto ao Instituto de Física de São Carlos - IFSC-USP, SP.

Inscritos: Drs. Alejandro López Castilho, Alessandro Paulo Sérvio de Moura, Attilio Cucchieri, José Cândido Xavier, Juan Pablo Neirotti, Klaus Werner Capelle, Luís

Aníbal Diambra, Marcelo de Moura Leite, Mauro Masili, Murilo da Silva Baptista, Tereza Cristina da Rocha Mendes e Virgílio de Carvalho dos Anjos.

Aprovado: Dr. Klaus Werner Capelle.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Antônio José Roque da Silva (IFUSP), Eduardo Cantera Marino (UFRJ), Jürgen Fritz Stileck (UFF), Lidério Citrângulo Loriatti Júnior (IFSCUSP) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP).

Período: de 19 a 23 de maio de 2003.

Caetano Rodrigues Miranda (Tese de Doutorado - Instituto de Física “Gleb Wataghin” da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP).

Título “Da Ordem à Desordem: uma Visão da Ciência dos Materiais Computacional”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), Alex Antonelli (orientador) (IFUNICAMP), Antônio José Roque da Silva (IFUSP), Eduardo Miranda (IFUNICAMP) e Edison Zacarias da Silva (IFUNICAMP).

Data: 16 de setembro de 2003.

Concurso para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor junto ao Instituto de Física “Gleb Wataghin” da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

Inscrito: Dr. Daniel Mário Ugarte.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Antônio José Roque da Silva (IFUSP), Fernando Cerdeira, Jacobus Willibrordus Swart (FEEC/UNICAMP), Marcos Assunção Pimenta (DF/UFGM) Omar Teschke (IF/UNICAMP).

Período: de 24 a 25 de novembro de 2003.

Carmen Silvia de Moya Partiti

Maria de Fátima Fontes Lelis (Tese de Doutorado - Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG).

Título: “Ferritas Dopadas com Níquel ou Cobalto: Síntese, Caracterização e Ação Catalítica na Oxidação do Monóxido de Carbono”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Carmen Silvia de Moya Partiti (IFUSP), José Domingos Fabris (UFMG) (orientador), Nelson Gonçalves Fernandes (UFMG), Vijayendra Kumar Garg (UnB-Brasília) e Wagner da Nova Mussel (UFMG).

Data: 14 de março de 2003.

Rodrigo Leonardo de Oliveira Basso (Dissertação de Mestrado - Instituto de Física da Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP).

Título: “Espectroscopia Mossbauer aplicada ao estudo de aços inoxidáveis nitretados por plasma”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adilson Jesus de Oliveira (UFSCar), Carmen Silvia de Moya Partiti (IFUSP) e Sylvio Dionysio de Souza (UFSCar) (orientador).

Data: 25 de março de 2003.

Gerardo Fabián Goya

Eduardo Carvalho Sousa (Dissertação de Mestrado - Instituto de Física da Universidade de Brasília, Brasília, DF).

Título: “Investigações Experimentais a Baixas Temperaturas da Dinâmica de Nanopartículas de Ferrita de Níquel Utilizadas na Elaboração de Fluidos Magnéticos”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Jérôme Depeyrot (UnB-Brasília) (orientador), Francisco Augusto Tourinho (UnB-Brasília) e Gerardo Fabián Goya (IFUSP).

Data: 12 de fevereiro de 2003.

Rodrigo Fernando Costa Marques (Tese de Doutorado - Instituto de Química da UNESP de Araraquara, Araraquara, SP).

Título: “Manganita de Lantânio dopada Com Estrôncio: Magnetoresistência e Magnetorefletividade”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Eudes Borges de Araújo (EE UNESP Ilha Solteira), Gerardo Fabián Goya (IFUSP), Luiz Antônio Andrade de Oliveira (IQ UNESP Araraquara), Miguel Jafellicci Junior (IQ UNESP Araraquara) (orientador) e Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP).

Data: 22 de abril de 2003.

Ênio Lima Júnior (Tese de Doutorado - Departamento de Física da Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC).

Título: “Estudos de Propriedades Estruturais e Magnéticas de $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ Nanocristalinas”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Elisa Baggio Saitovitch (CBPF), Gerardo Fabián Goya (IFUSP), João Cardoso de Lima (orientador) (FSC-UFSC), Kleber Daum Machado (FSC-UFSC), Paulo Fernando Papelero Fichtner (IF-UFRGS) e Valderes Drago (FSC-UFSC).

Data: 17 de outubro de 2003.

Hercílio Rodolfo Rechenberg

Adriana Medeiros Gama (Dissertação de Mestrado - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, SP).

Título: “Efeito das Proporções de Mn/Zn e Fe/Mn+Zn na Temperatura de Curie de Ferrites do Tipo $(\text{Mn}+\text{Zn})_{(1-x)}\text{Fe}_{(2+x)}\text{O}_{(4+\delta)}$ ”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Douglas Gouvêa (EPUSP), Fernando José Gomes Landgraf (EPUSP) (orientador) e Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP).

Data: 13 de março de 2003.

Laudemir Carlos Varanda (Tese de Doutorado - Instituto de Química da UNESP de Araraquara, Araraquara, SP).

Título: “Nanopartículas aciculares metálicas de Fe, FeCo, FeTR e FeCoTR (TR=La-Tb) para sensores e tecnologia avançada de gravação magnética”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP), Luiz Antônio Andrade de Oliveira (IQUNESP - Araraquara), Miguel Jafellicci Júnior (IQ UNESP Araraquara), Paulo César de Moraes (UnB-Brasília) e Younes Messaddeq (IQ UNESP Araraquara).

Data: 23 de junho de 2003.

Cleilton Rocha Alves (Dissertação de Mestrado - Instituto de Física da Universidade de Brasília, Brasília, DF).

Título: “Comportamento da Magnetização em Função da Temperatura e Estudo do Congelamento dos Spins de Superfície em Nanoestruturas de Ferrita de Cobre utilizadas na Elaboração de Ferrofluidos”.

Comissão examinadora: Profs. Drs. Francisco Augusto Tourinho (UnB-Brasília), Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP) e Jérôme Depeyrot (orientador) (UnB-Brasília).

Data: 23 de setembro de 2003.

José Roberto Leite

Concurso de Livre-Docência junto ao Departamento de Física e Ciência dos Materiais do Instituto de Física de São Carlos, USP, São Carlos, SP.

Inscrito: Prof. Dr. Guo-Qiang Hai.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Alaor Silvério Chaves (UFMG), Belita Koiller (UFRJ), José Roberto Leite (IF-USP), Eduardo Miranda (UNICAMP) e Francisco Castilho Alcaraz (IFSC-USP).

Membro Suplente: Prof. Dr. Adalberto Fazzio (IFUSP) em substituição à Profa. Dra. Belita Koiller (UFRJ).

Período: de 06 a 07 de fevereiro de 2003.

Concurso para o Provimento de um Cargo de Professor Titular junto ao Instituto de Física da Universidade de Brasília, Brasília, DF.

Inscritos: Profs. Drs. Álvaro Ferraz Filho, Antônio Cleves Nunes Oliveira, Antônio Luciano de Almeida Fonseca, Fernando Albuquerque de Oliveira, Geraldo Magela e Silva, Joaquim José Soares Neto, José Wadih Maluf, Kleber Carlos Mundim, Marco Antônio Amato, Oleg Grigorievich Palev, Paulo César de Moraes, Tarcísio Marciano da Rocha Filho e Viktor Dodonov.

Indicado: Prof. Dr. Viktor Dodonov.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), José Roberto Leite (IFUSP), Ricardo Magnus Osório Galvão (IFUSP), Rubens Aldrovandi (UNESP) e Reinhardt Adolfo Fuck (Unb-Brasília).

Período: de 17 a 19 de março de 2003.

Marília Junqueira Caldas

Concurso para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor junto ao Instituto de Física de São Carlos - IFSC-USP, SP.

Inscritos: Drs. Dr. Ailton Cavalli (desistente), Dr. Antônio Riul Júnior, Dr. Carlos José Leopoldo Constantino (desistente), Dr. José Eduardo de Albuquerque, Dr. Manuel Henrique Lente, Dra. Maria Leticia Veja (desistente), Dr. Paulo Neilson Marques dos Anjos, Dr. Paulo Barbeitas Miranda, Dra. Raigna Augusta da Silva Zadra Armond (ausente), Dr. Rodrigo Fernando Bianchi, Dra. Viviane Pilla (ausente).

Aprovado: Prof. Dr. Paulo Barbeitas Miranda

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Edson Antônio Ticianelli (IQSCUSP), Eduardo Ernesto Castellano (IFSC-USP), Marília Junqueira Caldas (IFUSP), Teresa Dib Zambon Atvars (IQUNICAMP) e Yoshio Kawano (IQUSP).

Período: de 07 a 10 de abril de 2003.

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

Concurso para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor junto ao Instituto de Física “Gleb Wataghin” da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

Inscrito: Dr. Pascoal José Giglio Pagliuso.

Aprovado: Dr. Pascoal José Giglio Pagliuso.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Elisa Maria Baggio Saitovitch (CBPF), Flávio Cesar Guimarães Gandra (IFUNICAMP), Nei Fernandes de Oliveira Júnior, Oscar Ferreira de Lima (IFUNICAMP) e Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP).

Período: de 24 a 25 de junho de 2003.

Concurso de Livre-Docência junto ao Instituto de Física “Gleb Wataghin” da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

Inscrito: Prof. Dr. Daniel Mario Ugarte.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Alex Antonelli (IFUNICAMP), Antônio Martins Figueiredo Neto (IFUSP), Fernando Álvares (IFUNICAMP), Horácio Carlos Panepucci (IFUSP-São Carlos) e Nei Fernandes de Oliveira Jr. (IFUSP).

Período: 08 a 09 de setembro de 2003.

Renato de Figueiredo Jardim

Gustavo Montgomery Bonfim Castro (Dissertação de Mestrado - Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE)

Título: “Estudo da Magnetoimpedância em $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ e $\text{La}_{0.6}\text{Y}_{0.1}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ ”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Ernesto Carneiro Pessoa Raposo (DFUFPE), Fernando Luis de Araujo Machado (DFUFPE) (orientador) e Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP).

Data: 16 de abril de 2003.

Rodrigo Fernando Costa Marques (Tese de Doutorado - Instituto de Química da UNESP de Araraquara, Araraquara, SP).

Título: “Manganita de Lantânio dopada Com Estrôncio: Magnetoresistência e Magnetorefletividade”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Eudes Borges de Araújo (EE UNESP Ilha Solteira), Gerardo Fabián Goya (IFUSP), Luiz Antônio Andrade de Oliveira (IQ UNESP Araraquara), Miguel Jafelicci Junior (IQ UNESP Araraquara) (orientador) e Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP).

Data: 22 de abril de 2003.

Concurso para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor junto ao Instituto de Física “Gleb Wataghin” da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

Inscrito: Dr. Pascoal José Giglio Pagliuso.

Aprovado: Dr. Pascoal José Giglio Pagliuso.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Elisa Maria Baggio Saitovitch (CBPF), Flávio Cesar Guimarães Gandra (IFUNICAMP), Nei Fernandes de Oliveira Júnior, Oscar Ferreira de Lima (IFUNICAMP) e Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP).

Período: de 24 a 25 de junho de 2003.

Zélia Soares Macedo (Tese de Doutorado - Instituto de Física de São Carlos - IFSC-USP, SP).

Título: “Sinterização à Laser e Caracterização Física dos Compostos $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$ e $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ ”.

Comissão Julgadora: Antônio Carlos Hernandes (IFSC-USP) (orientador), Antônio Ricardo Zanatta (IFSCUSP), Jose Antônio Eiras (UFSCar), Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP) e Roberto Luiz Moreira (UFMG).

Período: de 31 de julho a 1º de agosto de 2003.

Nelson Guilherme Castelli Astrath (Dissertação de Mestrado - Departamento de Física da Universidade Estadual de Maringá, Maringá, PR).

Título: “Um Novo Modelo Fenomenológico para o Calor Específico de Materiais Não-Cristalinos em Baixa Temperatura”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs Luiz Roberto Evangelista (UEM), Mauro Baesso (orientador) (UEM) e Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP).

Data: 28 de novembro de 2003.

Concurso para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor junto ao Instituto de Física de São Carlos - IFSC-USP, SP.

Inscritos: Dr. Fernando Remigio Tamariz Luna; Dra. Mônica Santos Dahmouche; Dr. Eudes Borges de Araújo; Dr. Júlio Antônio Nieri de Toledo Soares; Dr. Gustavo Deczka Telles; 6) Dr. Sérgio Ricardo Muniz, Dr. Jean Claude M'Peko; Dr. Manuel Henrique Lente; Dr. Diógenes Reyes Ardila e Dr. George Cunha Cardoso.

Aprovado: Dr. Jean Claude M'Peko.

Comissão Julgadora: Professores Doutores Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior (IFSC), Roberto Luiz Moreira (UFMG), Renato de Figueiredo Jardim (IF/USP), Marco Aurélio Pinheiro Lima (UNICAMP) e Nelson Velho de Castro Faria (UFRJ).

Membros Suplentes: Professores Doutores: Igor Polikarpov (IFSC/USP), José Alberto Giacometti (UNESP/Presidente Prudente), Fernando Jorge da Paixão Filho (UNICAMP) e Artur da Silva Gouveia Neto (UFRPE).

Período: de 1º a 04 de dezembro de 2003.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Cristina Porto Gonçalves (Tese de Doutorado - Departamento de Física da Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG).

Título: “Teoria do SCF-MO-LCAO dos Efeitos de Massa Nuclear Finita em Moléculas e Isotopômeros”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Amary César Ferreira (UFMG), Antônio Luciano de Almeida Fonseca (Unb-Brasília), José Rachid Mohallem (UFMG), Ricardo Wagner Nunes (UFMG) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP).

Data: 09 de abril de 2003.

Concurso para o Provimento de um Cargo de Professor Adjunto junto ao Departamento de Física da Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC.

Inscritos: Profs. Drs. Alexandre Grezzi de Miranda Schmidt, Antônio Nemer Kanaan Neto, César Augusto Caretta, Cristiano da Rocha, Gilberto Aparecido Prataviera, Irapuan Rodrigues de Oliveira Filho, João Pacheco Bicudo Cabral de Melo, Kleber

Daum Machado, Luiz Guilherme de Carvalho Rego, Marcelo de Moura Leite, Márcio Santos, Marco Aurélio Silveira Boff, Marcos César de Oliveira, Maurizio Ruzzi, Mauro Donizete Tonasse, Ernesto Kemp, Sebastião Cassemiro de Figueiredo Filho, Walter Manuel Orellana Muñoz.

Aprovado: Prof. Dr. Antônio Nemer Kanaã Neto.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Amir O. Caldeira (IFUNICAMP), Raul Donângelo (IFUFRJ) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP).

Período: de 23 a 29 de março de 2003.

Concurso para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor junto ao Instituto de Física de São Carlos - IFSC-USP, SP.

Inscrito: Dr. Eduardo Ribeiro de Azevedo.

Aprovado: Dr. Eduardo Ribeiro de Azevedo.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Alberto Passos Guimarães Filho (CBPF), Carlos Rettori (UNICAMP), Cláudio José Magon (IFSC), Sérgio Carlos Zílio (IFSC) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP).

Período: de 02 a 03 de abril de 2003.

Concurso para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor junto ao Instituto de Física de São Carlos - IFSC-USP, SP.

Inscritos: Drs. Alejandro López Castilho, Alessandro Paulo Sérvio de Moura, Attilio Cucchieri, José Cândido Xavier, Juan Pablo Neirotti, Klaus Werner Capelle, Luís Aníbal Diambra, Marcelo de Moura Leite, Mauro Masili, Murilo da Silva Baptista, Tereza Cristina da Rocha Mendes e Virgílio de Carvalho dos Anjos.

Aprovado: Dr. Klaus Werner Capelle.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Antônio José Roque da Silva (IFUSP), Eduardo Cantera Marino (UFRJ), Jürgen Fritz Stilck (UFF) e Lidério Citrângulo Ioriatti (IFSCUSP) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP).

Período: de 19 a 23 de maio de 2003.

Sérgio Duvoisin Júnior (Tese de Doutorado - Departamento de Física da Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC).

Título: “Estudo Teórico de Sistemas Moleculares Simples (Dímeros) e Complexos (APFO/H₂O) Baseado em Cálculos de Primeiros Princípios”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Carlos Alberto Kuhnen (Deptº Física/UFSC-orientador), Fernando Rei Ornellas (IQUSP), Gerson Renzetti Ouriques (Deptº Física/UFSC), Norberto Sanchez Gonçalves (Deptº Química/UFSC), Ricardo José Nunes (Deptº Química/UFSC) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP).

Período: de 05 a 06 de dezembro de 2003.

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

Adalberto Fazzio

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

Membro Titular da Academia Brasileira de Ciências.

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

Helena Maria Petrilli

Membro do Comitê Internacional de Interações Quadrupolares (mandato: de 1999 a 2004).

José Roberto Leite

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

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 *Modern Physics Letters B*, publicada pela World Scientific, Singapore.

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

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

Marília Junqueira Caldas

Membro da Comissão Internacional de Semicondutores (C-8) - a partir de setembro de 1999 - International Union for Pure and Applied Physics (IUPAP).

Membro do Conselho da Sociedade Brasileira de Física (mandato: de 2003 a 2005).

Membro do International Advisory Committee of the International Conference on Defects in Semiconductors (ICDS) (a partir de 1991).

Presidente do Conselho Diretor do Laboratório de Computação Científica Avançada LCCA/CCE/USP (a partir de outubro de 2000).

Renato de Figueiredo Jardim

Assessoria prestada ao Programa de Pós-Graduação em Química Fundamental do Instituto de Química da Universidade de São Paulo, São Paulo, SP.

Assessoria prestada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

Assessoria prestada ao Programa de Pós-Graduação em Ciências dos Materiais do Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo, São Carlos, SP.

Assessoria prestada ao Programa de Pós-Graduação do Instituto de Física da Universidade de São Paulo, São Paulo, SP.

Assessoria prestada à Câmara Curricular e do Vestibular do Conselho de Graduação da Universidade de São Paulo, São Paulo, SP.

Coordenador do I Workshop de Laboratórios Didáticos do Instituto de Física da Universidade de São Paulo, São Paulo, SP (agosto de 2002).

Membro do Conselho Editorial da Revista de Circulação Internacional Materials Research (a partir de 1999).

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Editor Associado do *Brazilian Journal of Physics*.

Membro do Comitê Assessor de Física/Astronomia do CNPq.

Membro do Comitê da CAPES para Avaliação de Programas de Pós-Graduação.

Membro do Comitê Externo de Avaliação do Programa de Iniciação Científica (Programa PIBIC do CNPq) da Universidad de Mogi das Cruzes.

Membro do Corpo Editorial da *Computer Physics Communications*.

Membro do Corpo Editorial da *International Journal of Quantum Chemistry*.

Membro Suplente da Comissão de Credenciamento das revistas que serão subsidiadas pelo Programa de Apoio às Publicações Científicas Periódicas da USP (mandato: de 07 de fevereiro de 2003 a 06 de fevereiro de 2006).

Membro Titular do Conselho da Sociedade Brasileira de Física.

3h - Participação em Comissões Eleitorais:

Antônio Domingues dos Santos

Presidente da Comissão Eleitoral das Eleições dos Representantes dos Servidores Não Docentes, junto à Congregação do IFUSP.

Data: 17.06.2003

Lucy Vitória Credidio Assali

Presidente da Comissão Eleitoral das Eleições da Diretoria e Conselho da Sociedade Brasileira de Física.

Data: 26.06.2003

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
Marília Junqueira Caldas
Sylvio Roberto Accioly Canuto

Pós-Doutores:

Fernando de León Pérez - Fonte financiadora: FAPESP
Marcelo Ferreira da Silva - Fonte financiadora: FAPESP
Maurice de Koning - Fonte financiadora: FAPESP
Neemias Alves de Lima - Fonte financiadora: FAPESP
Roberto Rivelino de Melo Moreno - Fonte financiadora: FAPESP
Walter Manuel Orellana Muñoz - Fonte financiadora: FAPESP
Wanderlã Luis Scopel - Fonte financiadora: FAPESP

Doutorandos:

Cedrid Rocha Leão – Fonte financiadora: FAPESP
Eduardo Augusto Rissi - Fonte financiadora: FAPESP
Eudes Eterno Fileti - Fonte financiadora: FAPESP
Frederico Ayres de Oliveira Neto - Fonte financiadora: FAPESP
Frederico Dutilh Novaes - Fonte financiadora: CNPq
Henady Malarenko Junior - Fonte financiadora: FAPESP
Herbert de Castro Georg - Fonte financiadora: FAPESP
Ivana Zanella da Silva - Fonte financiadora: CNPq
Jeverson Teodoro Arantes Jr. - Fonte financiadora: FAPESP
José Carrijo de Faria Jr. - Fonte financiadora: CNPq
Karina de Oliveira Barbosa - Fonte financiadora: CNPq
Liliana Yolanda Ancalla Dávila - Fonte financiadora: FAPESP
Renato Borges Pontes - Fonte financiadora: FAPESP
Rolando Larico Mamani - Fonte financiadora: CNPq
Thaciana Valentina Malaspina Fileti - Fonte financiadora: CNPq
Valdemir Enéias Ludwig - Fonte financiadora: CNPq

Mestrados:

Alexandre Martins Mélo - Fonte financiadora: CNPq
Andrei Reyes Huamantinco - Fonte financiadora: FAPESP
Benedito Maurício da Silva - Fonte financiadora: CNPq

Edwin Hobi Jr. - Fonte financiadora: FAPESP
Ferenc Diniz Kiss - Fonte financiadora: CAPES
José Carrijo de Faria Jr. - Fonte financiadora: FAPESP
Marcelo Maia Garcia - Fonte financiadora: CNPq
Rolando Larico Mamani - Fonte financiadora: CNPq
Sandro Inácio de Souza - Fonte financiadora: CNPq
Sandro Pereira Vilela - Fonte financiadora: CNPq

Iniciação Científica:

Edwin Hobi Jr. - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC
Marcel Henrique Toniolo Galina - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC
Marco Aurélio Poles de Souza - Fonte financiadora: ----
Mariana Rossi Carvalho - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC
Rafael Dias de Menezes - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC
Rodrigo Ramos da Silva - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC

Colaboradoras Permanentes:

Sonia Frota-Pessôa
Wanda Valle Marcondes Machado

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:

Andréia Luísa da Rosa (University of Sussex, School of Life Sciences, Chemistry Department, Inglaterra). Data: 17.12.2003.
Benedito José Costa Cabral (Universidade de Lisboa, Portugal). Período: de 11.11 a 15.12.2003.
Douglas Soares Galvão (Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP). Datas: 14.02.2003; 26.03.2003; 25.08.2003 e 22.12.2003.
Francisco Eduardo Gontijo Guimarães (Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Carlos, SP). Data: 24.06.2003.
Jordan Del Nero (Universidade Federal do Pará, Departamento de Física, Belém, Pará). Período: de 1º.10 a 30.11.2003.
Klaus V. Capelle (Instituto de Química de São Carlos-USP, São Carlos, SP). Data: 29.08.2003.
Rosa Di Felice (Universidade de Modena, Modena, Itália). Período: de 1º.12.2003 a 05.01.2004.
Vítor José B. Torres (Universidade de Aveiro, Aveiro, Portugal). Período: de 08 a 21.01.2003.
Warren E. Pickett (Universidade da Califórnia, Departamento de Física, E.U.A.). Período: de 19 a 20.05.2003.

Pessoal Administrativo:

Marisa Fernandes da Silva
Sandra Regina Rodrigues Ribeiro

Grupo de Transição de Fase e Supercondutividade

Docentes:

Armando Paduan Filho
Carlos Castilla Becerra
Renato de Figueiredo Jardim

Pós-Doutor:

Fábio Coral Fonseca - Fonte financiadora: FAPESP

Doutorandos:

Alessandro de Souza Carneiro - Fonte financiadora: FAPESP
Ernesto Govea-Alcaide - Fonte financiadora: CAPES
José Antônio de Souza - Fonte financiadora: FAPESP
Zulmara Virgínia Carvalho - Fonte financiadora: FAPESP

Mestranda:

Sueli Hatsumi Masunaga - Fonte financiadora: FAPESP

Iniciação Científica:

Solange de Andrade - Fonte financiadora: FAPESP

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:

Jesus Javier Campo Ruiz (Inst. de Ciências dos Materiais de Aragon, CSIC, Aragon, Espanha). Período: de 26.01 a 15.02.2003.

Juan Antonio Capo Sanchez (Faculdade de Ciências Naturais, Universidade de Oriente, Santiago de Cuba, Cuba). Período: de 29.04 a 13.07.2003.

Milton Torikachvili (San Diego, State University, San Diego CA, USA). Período: de 1º a 15.06.2003.

Milton Torikachvili (San Diego, State University, San Diego CA, USA). Período: de 07 a 22.08.2003.

Pedro Demetrio Muñe Bandera (Faculdade de Ciências Naturais, Universidade de Oriente, Santiago de Cuba, Cuba). Período: de 07.08 a 26.08.2003.

Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas (LESBT)

Docentes:

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

Pós Doutorandos:

Luciana Kazumi Hanamoto - Fonte financiadora: FAPESP
Ramon Valls Martin - Fonte financiadora: FAPESP
Xavier Pierre Marie Gratens - Fonte financiadora: ----

Doutorandos:

John Carlos Mantilla Uchoa - Fonte financiadora: CNPq
Ricardo Faveron de Oliveira - Fonte financiadora: CAPES

Mestrando:

Sérgio Turano de Souza - Fonte financiadora: CNPq

Iniciação Científica:

Marcelo Scolaro Morlotti - - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC

Colaborador Permanente:

Valmir Antônio Chitta

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:

Gunter Bauer (Johannes Kleper University, Institute Semiconductor Physics, Linz, Austria).
Período: de 02 a 07.09.2003.

Paul M. Koenraad (Eindhoven University, COBRA Inter-university Research Institute,
Department of Physics, Eindhoven, Holanda). Data: 1^o.09.2003.

Tomasz Dietil (Institute of Physics, Polish Academy of Sciences, Varsóvia, Polónia).
Período: de 14 a 17.03.2003.

Yaacov Shapira (Tufts University, Boston, USA). Períodos: de 15 a 22.03.2003; de 14.06 a
05.07.2003 e de 26.12.2003 a 10.01.2004.

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
Gerardo Fabián Goya
Hercílio Rodolfo Rechenberg
Valquíria Villas Boas Gomes Missell

Pós-Doutores:

Luiz Guilherme Costa Melo - Fonte financiadora: FAPESP
Thelma de Souza Berquó - Fonte financiadora: FAPESP

Doutorandos:

Alessandro Martins - Fonte financiadora: FAPESP
Angela Dayana Barra Barrera - Fonte financiadora: FAPESP
Denis Rezende de Jesus - Fonte financiadora: CNPQ
Jeroen Schoenmaker - Fonte financiadora: FAPESP
Rafael Alejandro Cajacuri Merino - Fonte financiadora: FAPESP
Regina Keiko Murakami - Fonte financiadora: FAPESP

Mestrando:

Fábio de Oliveira Jorge - Fonte financiadora: sem bolsa

Iniciação Científica:

Leonardo N. Nóbrega - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC
Fábio de Oliveira Jorge - Fonte financiadora: sem bolsa

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:

Leonard Spinu (University of New Orleans, Advanced Materials Research Institute and Department of Physics, New Orleans, LA, EUA). Período: de 19 a 21.08.2003.

Sanjay Mathur (Institut für Neue Materialien, Saarbruecken, Alemanha). Período: de 22 a 24.08.2003.

Yves Souche (Laboratoire Louis Néel - CNRS, Grenoble, França). Período: de 02 a 19.12.2003.

Pessoal Técnico:

Marcelo Shiroma Lancarotte
Marco Antônio Meira
Paulo Sergio Martins da Silva
Renato Cohen
Sérgio Antônio Romero

Pessoal Administrativo:

Iran Mamedes de Amorim

Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS-MBE)

Docentes:

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

Pós-Doutores:

Júlio Antônio Nieri de Toledo Soares - Fonte financiadora: FAPESP
Lara Kühl Teles - Fonte financiadora: FAPESP

Nilo Maurício Sotomayor Choque - Fonte financiadora: FAPESP

Sara Cristina Pinto Rodrigues - Fonte financiadora: FAPESP

Doutorandos:

Adriano Manoel dos Santos - Fonte financiadora: CAPES

Angela Maria Ortiz de Zevallos Marquez - Fonte financiadora: CNPq

Cássio Sangüini Sergio - Fonte financiadora: FAPESP

Celso de Araújo Duarte - Fonte financiadora: CNPq

David Gregorio Pacheco Salazar - Fonte financiadora: FAPESP

Marcelo Marques - Fonte financiadora: FAPESP

Odille Cué Noriega - Fonte financiadora: ----

Mestrandos:

Ivan Ramos Pagnossin - Fonte financiadora: FAPESP

Joelson Cott Garcia - Fonte financiadora: CAPES

Sérgio Takimoto Maurício - Fonte financiadora: ----

Iniciação Científica:

Jefferson Gomes da Silva - - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC

Renato de Carvalho - - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC

Tiago Ezequiel Corrêa - - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:

Antônio Tadeu Lino (Universidade Federal de Uberlândia, Departamento de Física, Uberlândia, MG). Período: de 10 a 14.10.2003.

Detlef Schikora (Universidade Paderborn, Departamento de Física, Paderborn, Alemanha). Período: de 25.01 a 09.02.2003.

Eliermes Arraes Meneses (Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP). Visitas semanais.

Fernando Cerdeira (Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP). Visitas semanais.

Ivan Costa da Cunha Lima (Universidade Estadual do Rio de Janeiro, Instituto de Física, Rio de Janeiro, RJ). Período: de 1º.03 a 31.08.2003.

Luiz Guimarães Ferreira (Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP). Data: 02.06.2003.

Oleg Balev (Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP). Período: 01/2003 e 17.06.2003.

Valder Nogueira Freire (Universidade Federal do Ceará, Departamento de Física, Fortaleza, Ceará). Período: de 30 a 31.10.2003.

Pessoal Técnico:

Márcia Ribeiro

José Geraldo Chagas

Pessoal Administrativo:

Mônica Jimenez Clauzet

4b - Trabalhos em Andamento ou Concluídos em 2003:

Grupo Teórico de Materiais

Coordenadores: Adalberto Fazzio, Sylvio Canuto, Marília Junqueira Caldas e Armando Corbani Ferraz

“Simulação Aplicada em Materiais: Propriedades Atomísticas (SAMPA)”

Fazzio, A e Silva, A.J.R. da

A pesquisa no campo da Nanociência tem se desenvolvido sobremaneira nos últimos anos e recebido grande destaque em diferentes áreas do conhecimento, como a Física, Química, Biologia e Engenharia. Uma parte desse interesse advém do fato dos sistemas físicos apresentarem novos comportamentos quando manipulados em escalas nanométricas. Essas propriedades únicas dos sistemas nanoestruturados, mesmo para materiais bem entendidos como Au, por exemplo, levam à criação de uma nova sub-área do conhecimento, a qual requer estudos que permitam que seus paradigmas sejam estabelecidos. Nosso projeto é voltado ao estudo teórico de propriedades eletrônicas, estruturais, magnéticas e de transporte em materiais nanoestruturados. O foco principal de nossas atividades é a busca do conhecimento fundamental das propriedades físicas dos materiais por meio de simulações computacionais. Quando falamos em simulação computacional temos de ter em mente sua amplitude de enfoque. Utilizamos diferentes métodos e técnicas, como por exemplo: potenciais empíricos, semi-empíricos, cálculos Ab Initio, Dinâmica Molecular, Monte Carlo Metrópolis e Monte Carlo Cinético. Sem restringirmos muito nossa atuação, poderíamos definir nosso objetivo como o estudo de nanomateriais com interesse no confinamento quântico, que é a base dos fenômenos eletrônicos, óticos e de transporte em geral. Os sistemas e tópicos de interesse são: (i) Nanofios Metálicos; (ii) Nanotubos de Carbono; (iii) Quantum-dots em Matrizes Amorfas; (iv) Dielétricos Alternativos; (v) Atomística de Crescimento para o Sistema Si/Ge; (vi) Propriedades Termodinâmicas de Materiais; (vii) Defeitos Extensos em Semicondutores e (viii) Ferromagnetismo em Semicondutores.

“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 o 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 por meio de cálculos de primeiros princípios, a fim de se esclarecer tais mecanismos de formação atômica ou molecular. Desta forma,

estudamos teoricamente, por meio 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. No desenvolvimento destes projetos estiveram envolvidos o Prof. Ronei Miotto da Universidade de Brasília, os professores Roberto Hiroki Miwa e Eduardo Kojy Takahashi da Universidade Federal de Uberlândia, o Prof. G.P. Srivastava da Universidade de Exeter, Inglaterra, o pós-doutorando Fernando de León-Pérez de Cuba, e os estudantes de pós-graduação Ferenc Diniz Kiss e Sandro Inácio de Souza.

“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 com o objetivo de se estudar a estrutura eletrônica do estado fundamental e os estados excitados de interesse. Para poucas moléculas em interação, o objeto central é entender as forças intermoleculares envolvidas. Atenção é dada aos sistemas interagindo por meio de forças de van der Waals e ligações de hidrogênio.

Nosso maior interesse está no estudo de sistemas moleculares na fase líquida. Neste domínio, nossos estudos têm 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 juntamente com métodos de mecânica quântica.

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

“Estudo da Relação Estrutura-Função em Sistemas Semicondutores Orgânicos e Inorgânicos”

Caldas, M.J. - Grupo Nanomol

- 1) **Polímeros Orgânicos Conjugados** – Objetivos: Estudo da relação estrutura-função em polímeros orgânicos conjugados de interesse para a indústria de dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos. Os materiais incluem fenilenos, tiofenos (ótica), anilinas (transporte) e outros, funcionalizados ou não, e o interesse está na estrutura 3D e inclui investigação das interfaces polímero-metal e polímero-semicondutor. Utilizamos mecânica molecular, métodos de estrutura

eletrônica, e métodos estatísticos. Investigamos em particular as propriedades óticas, de modo ab initio, e propriedades de transporte em arranjos cristalinos.

- 2) **Sistemas Moleculares de Interesse Biológico ou Tecnológico** – Objetivos: Esclarecer aspectos conformacionais (geométricos) e eletrônico de materiais de interesse biológico e/ou tecnológico, em especial proteínas de cobre.
- 3) **Sistemas Semicondutores Complexos** – Objetivo: Estudo a nível microscópico de nanoestruturas semicondutoras e defeitos complexos em semicondutores, desde a atomística estrutural até propriedades eletrônicas e, se pertinente, óticas. Utilizamos técnicas empíricas de mecânica molecular, e métodos semiempíricos e ab-initio de estrutura eletrônica. Os materiais enfocados tem base de Si e óxido de Si, e estamos iniciando o estudo de viabilidade de estudar superfícies funcionalizadas.

“Propriedades Magnéticas e Hiperfinas de Sistemas Metálicos Complexos”

Frota-Pessôa, S.

Temos estudado, utilizando cálculos de estrutura eletrônica, o comportamento magnético (momento magnético orbital e de spin, acoplamento de troca J, etc...) 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: i) impurezas e defeitos em hospedeiros metálicos e ii) sistemas à duas dimensões (superfícies, multicamadas, etc...), bem como clusters, adátomos, e outros defeitos nesses sistemas.

Mantemos contato com vários grupos no Brasil e no exterior. Entre eles citamos o grupo da Universidade Livre de Berlim, liderado pelo Prof. Dr. William D. Brewer, o grupo da Universidade de Uppsalla (Uppsalla, Suécia), liderado pelo Prof. Dr. Olle Eriksson, o grupo do Prof. Dr. Roberto Bechara Muniz da Universidade Federal Fluminense (Niterói, RJ - Brasil) e o grupo da Profa. Dra. Ângela B. Klautau, da Universidade Federal do Pará (Belém, PA - Brasil).

“Simulação Computacional e Análise de Materiais (SCAM)”

Assali, L.V.C. e Machado, W.V.M.

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. Estes projetos têm a participação do Prof. Dr. João Francisco Justo Filho do Departamento de Sistemas Eletrônicos da Escola Politécnica da USP. 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 suavizando. A interação entre as duas esferas carregadas (Fe_i e As_s) é descrita por dois termos um que representa a energia de interação coulombiana e outro que representa o efeito de polarização induzida. Após esta investigação, iniciamos o estudo da estrutura eletrônica destes centros dentro de um formalismo de primeiros princípios.

b) Cálculos de estrutura eletrônica de defeitos relacionados com metais de transição e terras raras em diamante, Si, Ge, GaAs, GaN e SiC têm sido efetuados utilizando-se um modelo de super célula (*large unit cell*). Este estudo é feito substitucionais e intersticiais relacionados com metais de transição e terras raras 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.

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

Petrilli, H. M. - Grupo Nanomol

Temos nos dedicado tradicionalmente ao estudo de propriedades locais em materiais metálicos, utilizando cálculos teóricos de estrutura eletrônica de primeiros princípios. Por meio 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. Exploramos 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 disso, podemos contribuir para o desenho e identificação de compostos, como por exemplo no estudo de rádio-fármacos.

“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 $I \times V$ mostram que é possível identificar os mecanismos de tunelamento que contribuem para a estrutura fina presentes na curva característica.

Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas (LESBT)

a) Grupo de Baixas Temperaturas

Coordenador: Nei Fernandes de Oliveira Jr.

“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 das 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, constituindo-se 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 plástico, 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 a 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 os obtidos em ímãs híbridos e de campo pulsado.

“Estruturas Epitaxiais Semicondutoras”

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

Semicondutores fabricados por técnicas epitaxiais de crescimento são estudados por meio de suas propriedades ópticas e elétricas. As amostras, fabricadas por MOCVD, são caracterizadas por medidas de luminescência, transmissão óptica e absorção óptica, magnetorresistência, 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 k_p 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.

b) 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 $Ln_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$; $Ln=Pr, Nd, Sm, Eu$ 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 $Ln M O_u$; O_u ; $Ln=terra-rara, M=Ni, Cu, Mn$. Estes compostos apresentam efeitos interessantes, como transição de metal-isolante, supercondutividade e efeitos de magnetorresistência gigante. O nosso trabalho consiste em produzir e caracterizar estes compostos, por meio de diversas técnicas experimentais, como difração de Raios X, microscopia eletrônica, análise térmica diferencial, termogravimetria, resistividade elétrica, susceptibilidade magnética, magnetorresistividade, 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 $1700^\circ C$), 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. 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-metalicos por meio de medidas de susceptibilidade magnética e magnetização na presença de corpos 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”

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

O Laboratório de Supercondutividade está apto para caracterizar materiais de uma maneira geral por meio de diversas técnicas, i.g. resistividade elétrica, magnetorresistividade, 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 Materiais Magnéticos

Coordenador: Hercílio Rodolfo Rechenberg

“Efeitos da Superfície nas Propriedades Magnéticas de Nanopartículas de Ferritas Tipo Espinélio”

Rechenberg, H.R. e Goya, G.F.; Depeyrot, J. e Tourinho, F.A. (Universidade de Brasília)

As propriedades magnéticas de partículas com dimensões nanométricas podem diferir sensivelmente das do mesmo material em escala macroscópica, em virtude da fração relativamente grande de átomos próximos à superfície. Daí resultam efeitos como uma forte contribuição superficial à anisotropia magnética e (especialmente em materiais ferrimagnéticos) a ocorrência de spins desalinhados (*spin canting*) e/ou de uma estrutura tipo vidro de spins na camada exterior da partícula. Visando a um estudo detalhado desses efeitos, estamos investigando sistemas de nanopartículas de NiFe_2O_4 e CuFe_2O_4 sintetizadas quimicamente, com diâmetros de 4 a 10 nm, por meio de técnicas magnetométricas e espectroscopia Mössbauer em campos aplicados de até 12 T.

“Fases de Laves AFe_2 Antiferromagnéticas: Espectroscopia Mössbauer em Campos Magnéticos Elevados”

Rechenberg, H.R.; Ibarra, M.R., Algarabel, P.A. e Morellon, L. (Universidad de Zaragoza).

Nas fases de Laves AB_2 com a estrutura hexagonal C14 (tipo MgZn_2) o elemento B pode ocupar os dois sítios cristalográficos $6h$ e $2a$. O sítio $2a$ é um centro de inversão para a sub-rede $6h$, e em decorrência disto, o campo molecular no sítio $2a$ se anula quando os spins dos átomos $6h$ se ordenam antiferromagneticamente. Esta situação ocorre para um certo número de compostos AFe_2 , que são descritos na literatura como tendo um momento magnético nulo para o Fe em $2a$. Para verificar se tais átomos são não-magnéticos ou se têm um momento desordenado mas não nulo, investigamos o campo hiperfino do ^{57}Fe em função do campo magnético aplicado (até 12 T) nos antiferromagnetos TiFe_2 e $(\text{Hf}_{0.8}\text{Ta}_{0.2})\text{Fe}_2$. Nossos resultados mostraram que $\mu_{\text{Fe}}(2a) = 0$ e $\approx 0.5 \mu_{\text{B}}$, respectivamente, para esses dois compostos.

“Estudo de Compostos Intermetálicos $\text{A}(\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x)_2$ (A = Hf, Nb)

Merino, R.A.C. e Rechenberg, H.R.

Estamos investigando o efeito da substituição parcial de Fe por Cr nas fases de Laves HfFe_2 e NbFe_2 . O primeiro composto é ferromagnético ($T_{\text{C}} = 600$ K) e o segundo é um antiferromagneto itinerante tipo “spin density wave”, com $T_{\text{N}} = 18$ K. Ambos têm a estrutura hexagonal C14. As amostras são preparadas por fusão em forno de arco e serão examinadas por difração de Raios X, magnetometria e espectroscopia Mössbauer. Em particular, serão investigadas a estabilidade da estrutura C14 em relação à C15 (cúbica), e a ocorrência ou não da fase vidro de spins, anteriormente observada no sistema $\text{Zr}(\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x)_2$.

“Estrutura Magnética de Compostos Intermetálicos $\text{R}_6\text{Fe}_{11-x}\text{Al}_{3+x}$ por Difração de Nêutrons”

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

Amostras de $\text{R}_6\text{Fe}_{10}\text{Al}_4$ (R = La ou Nd) foram anteriormente estudadas por magnetometria de amostra vibrante, SQUID e espectrometria Mössbauer (tese de S.

Jonen). Esses materiais apresentam um ordenamento antiferromagnético constituído de camadas ferromagnéticas com spins alternadamente “up” e “down”, e exibem uma transição metamagnética ou “spin-flop” em campos da ordem de 2 T. Nos compostos com $R = \text{Nd}$ são observados efeitos adicionais de irreversibilidade, transições múltiplas, etc. que são atribuídas a um ordenamento não-colinear dos momentos da terra rara. Para elucidar estes efeitos estamos realizando medidas de difração de nêutrons na faixa de temperaturas 2-300 K, utilizando as facilidades do Instituto Laue-Langevin de Grenoble.

“Efeitos de Absorção de Hidrogênio sobre as Propriedades Estruturais, Eletrônicas e Magnéticas de Compostos Intermetálicos”

Vieira, I.E.F., Jonen, S. e Rechenberg, H.R. e Mestnik Filho, J. (IPEN).

Sistemas intermetálicos que absorvem hidrogênio apresentam alterações em suas propriedades magnéticas, atribuídas à expansão da rede cristalina e/ou a mudanças na estrutura eletrônica. Os compostos $R_6\text{Fe}_{13-x}\text{M}_{1+x}$ absorvem com facilidade até 15 átomos de H por fórmula unitária, resultando uma expansão volumétrica de ~20% e a mudança de antiferromagnetismo para ferromagnetismo. Tomando como base o composto $\text{La}_6\text{Fe}_{10}\text{Al}_4$, estamos estudando as propriedades do hidreto correspondente e, em particular, as transformações resultantes da retirada gradual e controlada do hidrogênio incorporado.

“Mecanosíntese e Caracterização de Ferritas Nanoestruturadas”

Goya, G.F. e Jiang, J.Z. (Technical University of Denmark).

Esta linha de pesquisa se destina à obtenção de compostos cerâmicos nanoestruturados do tipo dos óxidos e calcogenetos $\text{II-III}_2\text{-X}_4$, com II e III metais de transição e $X = \text{O, S, Se ou Te}$, por meio de técnicas de moagem mecânica e mecosíntese, em condições controladas de pressão e temperatura. 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 por meio de análise térmica diferencial, difração de Raios X, espectroscopia Mössbauer, magnetização, suscetibilidade e magnetorresistência. A análise estrutural visa determinar as características das fases resultantes, que são fases de não-equilíbrio termodinâmico. 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 ao 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. Os resultados são comparados com modelos atuais, tanto das partículas individuais (‘caroço/superfície’) quanto do comportamento coletivo (‘vidro de spin’).

“Interações Magnéticas em Sistemas Nanoestruturados”

Goya, G.F. e Morales, M.P. (CSIC, Madrid, Espanha).

Os materiais nanoestruturados apresentam características mistas de sistemas moleculares e microscópicos, combinando o potencial do pequeno tamanho, alta densidade de empacotamento e uma alta relação superfície/volume. As interações magnéticas em sistemas nanoestruturados são da maior importância pois elas determinam as propriedades finais (magnéticas, ópticas, de transporte) dos materiais a serem considerados. No Laboratório de Materiais Magnéticos, estudamos as interações magnéticas em sistemas de partículas da ordem de 1-100 nanômetros ($1\text{nm} = 10^{-9}\text{m}$), visando conhecer as múltiplas relações entre concentração, morfologia, polidispersão e estrutura interna das partículas constituintes. Os materiais pesquisados incluem compostos metálicos e cerâmicos nanoestruturados, tais como nanopartículas de Fe e Ni em matriz de SiO_2 , óxidos AB_2O_4 , com estrutura de espinélio e ortoferritas YFeO_3 . Procura-se determinar quais características fundamentais da transição superparamagnética e do estado ordenado são universais, no sentido de serem independentes do material escolhido.

“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 magnetoóptica a comprimentos de onda mais curtos é constituída por filmes cristalinos de Fe-Pt, Co-Pt e composições ternárias de Co-Fe-Pt.

Estudamos anteriormente, 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. Em relação aos filmes binários de Fe-Pt, estamos expandindo estes estudos. Podemos obter melhores resultados em relação à anisotropia e coercividade se conseguirmos produzir amostras ordenadas. Trabalhamos com a estequiometria FePt, com vistas a obter uma estrutura cristalina tetragonal e usamos substratos que possam induzir uma epitaxia conveniente para o ordenamento da estrutura do filme. Este substrato é o de MgO. Desenvolvemos estudos visando a otimização deste ordenamento, em função da espessura do filme de FePt e de um eventual “buffer” de Pt. Estudamos também o efeito da temperatura de deposição e de pós-tratamento térmico sobre o ordenamento cristalino e a anisotropia magnética. Para a análise deste ordenamento estrutural utilizamos as técnicas tradicionais de difração de Raios X, que serão complementadas por medidas de EXAFS a serem realizadas no Laboratório Nacional de Luz Sincrotron (LNLS).

“Difração Magnetoóptica e Plasmons de Superfície em Redes de Partículas Magnéticas”

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

Temos estudado os efeitos magnetoópticos 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 magnetoóptico ($\Delta R/R$) 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.

“Estudo do “Exchange Bias” em Bicamadas FeNi/AMn, A= Fe, Ni e Ir”

Barra-Barrera, A.D. e Santos, A.D.

O fenômeno de “exchange bias” foi observado por primeira vez em 1956 por Meiklejohn e Beam. Uma explicação qualitativa deste fenômeno foi associada com a anisotropia criada na interface entre um ferromagneto (FM) e um antiferromagneto (AFM) devido à interação de troca entre os mesmos. O fenômeno de “exchange bias” foi observado em diferentes sistemas constituídos de interfaces FM/AFM tais como em pequenas partículas, materiais homogêneos, filmes FM sobre monocristais AFM e filmes finos.

Em particular, o estudo de exchange bias em filmes finos de bicamadas FM/AFM teve maior interesse por fazerem parte de um dispositivo conhecido como “spin valve”. Este dispositivo têm importantes aplicações tecnológicas como sensores de campos magnéticos, uma vez que a magnetorresistência do “spin valve” é uma função sensível da orientação das suas camadas ferromagnéticas. O progresso

enorme na última década em aumentar a densidade de informações em discos rígidos resultou principalmente do desenvolvimento de cabeças de gravação empregando “spin valves”.

Muitos materiais antiferromagnéticos são utilizados para a obtenção de sistemas “exchange bias” como por exemplo, óxidos como NiO ou CoO ou compostos antiferromagnéticos de Mn. Um antiferromagneto especialmente interessante para aplicação em bicamadas FM/AFM é NiMn. Foi encontrado que filmes finos, contendo NiMn, apresentam um deslocamento da curva de histerese de aproximadamente 650 Oe, o maior valor já observado neste tipo de sistema. Neste projeto, o objetivo é estudar filmes finos de bicamadas magnéticas constituídas do ferromagneto NiFe e diferentes antiferromagnetos, tais como: FeMn, NiMn e IrMn.

“Microscopia Óptica de Varredura em Campo Próximo- Modo Magnetoóptico”

Schoenmaker, J.; Pojar, M. e Santos, A.D.

Desenvolvemos um microscópio óptico de varredura em campo próximo (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 por meio 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 óptica 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, pode-se 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 de novas configurações. Ele utiliza um diodo laser vermelho ($\lambda=635$ nm), fibras ópticas monomodo, células foto-multiplicadoras e polarizadores a película. Para a obtenção de uma pequena abertura na fibra óptica, 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 modo AFM é obtido vibrando-se a fibra por meio de uma bilamina piezoelétrica e o sensoriamento 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 óptico estão funcionando corretamente, porém como o sinal

magnetoóptico 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 magnetoóptico nos permitiram extrair ciclos de histerese locais na amostra, e imagens de susceptibilidade magnética. 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 Amorfais”

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.

“A Caracterização de Sedimentos da Baixada Santista, São Paulo – Um Estudo do Magnetismo Ambiental”

Partiti, C.S.M.; Jorge, F.O.; Mahiquos, H.M.(IO-USP); Martins, C.C. (IO-USP); Figueira, R.C.L. (U.C. Sul)

Estamos estudando um conjunto de sedimentos da Baixada Santista – Rio Casqueiro, por Espectroscopia Mössbauer e susceptibilidade Magnética; com o objetivo de identificar as fases de ferro presentes. Este estudo tem um interesse acadêmico que se refere aos portadores de ferro presentes nos sedimentos e por outro lado, um interesse aplicado, pois esses parâmetros poderão ser utilizados na análise e controle de impactos ambientais.

“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 por meio de um tratamento térmico convencional e por meio 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.

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.; Lischka, K.; (Universidade de Paderborn, Alemanha); Schikora, D. (Universidade de Paderborn, Alemanha); Tabata, A. (Universidade Estadual de Bauru); Meneses, E.A. (UNICAMP); Cerdeira, F. (UNICAMP); Galzerani, J.C. (UFSCar); As, D.J. (Universidade de Paderborn, Alemanha); Husberg, O. (Universidade de Paderborn, Alemanha); Fernandez, J.R.L.; Noriega, O.C.; Chitta, V. (USF).

Técnicas experimentais de espectroscopia Raman e micro-Raman, fotoreflêtância, fotoluminescência, de medidas elétricas, etc., estão sendo usadas para estudar as propriedades de GaN e de suas ligas, AlGaN e InGaN, em fase cúbica crescidos por MBE. Têm sido feitos estudos no sentido de otimizar a dopagem tipo n e tipo p em GaN, com o objetivo final de construir-se LEDs e Lasers operando na região do azul e UV.

“Estrutura Eletrônica e de Buracos em Hetero-estruturas Semicondutoras de Materiais III-V e de Nitretos do grupo-III, Dopadas com Manganês”

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

Utilizamos os modelos de Luttinger-Kohn e Kane e o método **k.p** generalizados para o tratamento de heterointerfaces para obter as estruturas de bandas eletrônicas e de buracos em hetero-estruturas semicondutoras, tais como GaAs/AlGaAs, InGaAs/GaAs, AlGaIn/GaN e GaN/InGaIn não dopadas, bem como dopadas com impurezas de Manganês (GaMnAs, GaMnN, etc.) as quais vêm sendo recentemente bastante estudadas para aplicações em “spintrônica”. Para as hetero-estruturas dopadas, a equação da massa efetiva de multibandas é resolvida juntamente com a equação de Poisson, de maneira autoconsistente, onde também se leva em conta o potencial magnético devido aos íons de Mn. Efeitos de tensão, da inclusão da interação spin-órbita, e do uso de diferentes parâmetros de massa efetiva para os diferentes materiais são incluídos nos cálculos.

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

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

Cálculos de estrutura eletrônica e de propriedades relacionadas, dos semicondutores de “gap” largo da família dos Nitretos (*GaN*, *AlN*, *InN*, *BN*) e das ligas envolvendo os mesmos, bem como de suas hetero-estruturas, estão sendo efetuados por meio de métodos de primeiros princípios, o FLAPW e o pseudopotencial VASP. São estudadas superfícies, interfaces, impurezas, defeitos, bem como as propriedades termodinâmicas, estruturais, eletrônicas e vibracionais destes sistemas.

“Caracterização de Hetero-estruturas Semicondutoras utilizadas na Fabricação de Fotodetectores operando na Faixa de Micrômetros”

Silva, E.C.F. da; Pagnossin, I.R.; Quivy, A.A. e Maurício, S.T.

Este projeto de pesquisa envolve o estudo das propriedades elétricas e eletrônicas de hetero-estruturas semicondutoras contendo pontos quânticos (QDs, quantum dots), crescidas pela técnica de epitaxia por feixe molecular (MBE), utilizando medidas elétrica e de fotoluminescência. Pretendemos analisar estruturas com arquiteturas que servem de base para a fabricação de fotodetectores operando na faixa de décimos de micrometros. Em geral, estas estruturas têm um gás bidimensional de elétrons nas imediações dos QDs; e nossa intenção é determinar as características dos portadores deste gás (ocupações das sub-bandas e suas respectivas mobilidades) com o intuito de otimizar o desempenho destes dispositivos. A primeira demonstração que os QDs

são eficientes detectores de radiação infravermelha foi reportada em novembro de 1998 por S.J. Xu e colaboradores[1]. A partir desta data, estruturas com diferentes arquiteturas têm sido propostas para a confecção destes fotodetectores e suas potencialidades estão sendo testadas. Este também é o nosso intuito.

A função de um fotodetector é converter o resultado de excitação óptica em sinal elétrico. Basicamente, uma estrutura típica de um fotocondutor lateral[2] de QDs consiste de uma estrutura de poço quântico com dopagem modulada na barreira contendo no interior do poço uma camada de pontos quânticos. Os elétrons oriundos dos dopantes na barreira são transferidos para o interior do poço quântico e capturados pelos QDs. Em uma situação ideal, devemos ter apenas elétrons confinados nos QDs e não no poço quântico. A presença de um gás bidimensional de elétrons dá origem a uma corrente de escuro, indesejável para o bom desempenho do fotodetector. Com a incidência da radiação infravermelha, os elétrons são excitados dos QDs para os estados acessíveis do poço quântico, gerando corrente elétrica. Para ter um bom desempenho, os fotodetectores devem ter alta sensibilidade, alta velocidade de resposta e ruído mínimo. Além disso, devem ser compactos, devem utilizar baixas voltagens e correntes e serem confiáveis sob as condições de operação. O ganho fotocondutivo de um fotodetector pode ser expresso como $G_{ph} \propto \mu \tau$ onde μ e τ são a mobilidade e o tempo de vida dos portadores fotoexcitados, respectivamente. Esta equação indica-nos que para melhorar o desempenho de um fotocondutor devemos ter portadores com alta mobilidade e longo tempo de vida no canal condutor. Em particular, o bom desempenho de fotodetectores de QDs depende das seguintes características: 1) O tamanho dos QDs deve ser tal que eles tenham apenas um estado ligado. Desta forma, os QDs tornam-se neutros depois de serem excitados pela radiação infravermelha e não mais atuam como centros de espalhamento Coulombiano para o transporte eletrônico lateral. 2) O(s) canal(is) condutores devem proporcionar altas mobilidades aos portadores fotogerados. 3) Os portadores fotoexcitados devem ter um longo tempo de vida para que possam gerar corrente antes de serem novamente capturados pelos QDs. 4) Para minimizar a corrente de escuro, a arquitetura da amostra deve ser otimizada de forma que apenas os QDs estejam ocupados. Deve-se portanto, adequar a concentração dos dopantes na barreira, com a ocupação dos QDs. 5) Outro fator importante é a homogeneidade de tamanho dos QDs para que a detecção ocorra em uma faixa bem definida de energia e com uma banda estreita. 6) Um outro aspecto importante é que a intensidade da corrente fotogerada deve ser maximizada. Para isto, a hetero-estrutura deve conter vários períodos. No entanto, esta arquitetura pode gerar tensões internas que ocasionam uma degradação da morfologia dos QDs. Como podemos observar, a otimização do desempenho de fotodetectores de QDs depende de uma série de parâmetros e do próprio comportamento dos portadores fotogerados nestas estruturas. Pretendemos, portanto, investigar com medidas elétricas as características dos portadores fotogerados. Analisaremos arquiteturas com diferentes dimensões para o canal condutor, para as camadas de espaçamento entre os dopantes e os elétrons, e para diferentes concentrações dos QDs. A influência do número de períodos nas estruturas também será investigada.

- [1] Characteristics of InGaAs quantum dot infrared photodetectors, S. J. Xu, S.J. Chua, T. Mei, X.C. Wang, X.H. Zhang, X.G. Xie, Appl. Phys. Lett. **73**, 3153 (1998).
- [2] Bound-to-continuum intersubband photoconductivity of self-assembled InAs quantum dots in modulation-doped heterostructures, S.-W. Lee, K. Hirakawa and Y. Shimada, Appl. Phys. Lett. **75**, 1428 (1999).

“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); Furthmüller, J. (Univ. de Jena, Alemanha) e Ferreira, L.G. (UNICAMP).

Estão sendo estudadas as propriedades estruturais, eletrônicas e termodinâmicas de ligas quaternárias tipo $\text{In}_x\text{Al}_{1-x-y}\text{Ga}_y\text{N}$ nas fases zinc-blende e wurtzita, através do método Ab Initio de cálculo de estrutura eletrônica (pseudopotencial VASP) acoplado ao método de expansão em “clusters”, tanto dentro da aproximação quase-química generalizada, como por meio de simulações Monte Carlo, para o tratamento dos efeitos de desordem e flutuações na liga. Diversas quantidades são obtidas: parâmetros de rede, distâncias de ligação, “bulk modulus”, diagramas de fase, “gap” de energia, etc. As ligas ternárias, sub-produtos das ligas quaternárias, são também analisadas. Os estudos estão sendo estendidos a hetero-estruturas, do tipo InGaN/GaN e AlGaIn/GaN, com a inclusão de efeitos da tensão biaxial nas simulações teóricas da liga. São investigados os efeitos de separação de fase e de ordenamento nas ligas.

“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 magnetorresistência em campos inclinados, permitindo observar de forma aproximada os mesmos efeitos observados nas medidas experimentais. Nós investigamos também as oscilações anômalas da magnetorresistência 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.

“Magnetotransporte de um Gás de Elétrons Quase-Tridimensional no Nível de Landau mais Baixo”

Gusev, G.M. ; Quivy, A.A.; Lamas, T.E.; Leite, J.R.; Estibals, O.; Portal, J.C. (High Magnetic Field Laboratory, Grenoble, France)

O objetivo deste trabalho é o estudo experimental do transporte eletrônico no gás quase-tridimensional (poços quânticos parabólicos) em campos magnéticos intensos (limite quântico). Nós temos medido a magnetorresistência de poços quânticos parabólicos de AlGaAs com diferentes larguras ($W=1000 - 4000 \text{ \AA}$) na presença de campo magnético inclinado. Nós temos observado estruturas na magnetorresistência a valores do campo magnético três vezes maiores que o valor fundamental de campo correspondente à depopulação do último nível de Landau. A estrutura observada na magnetorresistência desloca-se em função de parâmetros específicos das amostras, tais como a largura do potencial, desaparecendo em temperaturas altas e decresce com a mobilidade. Nós sugerimos a formação de novos estados correlacionados do gás de elétrons tridimensional a valores do fator de preenchimento de Landau de $1/3$, em analogia com o efeito Hall quântico fracionário bidimensional.

“Instabilidade de Onda de Densidade de Carga Num Sistema Hall Quântico Multicomponente”

Gusev, G.M.; Sergio, C.S.; Quivy, A.A.; Lamas, T.E.; Leite, J.R.; Estibals, O. e J.C.Portal (High Magnetic Field Laboratory, Grenoble, France)

O efeito Hall quântico integral (QHE) pode ser explicado no contexto de elétrons não interagentes. A incorporação da interação elétron-elétron conduz a uma variedade de fases eletrônicas incomuns. Recentemente, variedades de fases correlacionadas do QHE foram previstas, quando graus de liberdade adicionais, associados com números de camadas 2D e sub-bandas foram introduzidos. O poço parabólico permite a formação de uma camada grossa e diluída ($1000-5000 \text{ \AA}$) de portadores de carga com alta mobilidade com densidade uniforme (ao longo de direção de crescimento). Num PQW largo com várias sub-bandas ocupadas, o gap de energia em campo magnético intenso é determinado pelo espaçamento de níveis de energia em campo zero ΔE_{ij} , o qual é muito menor que a energia do ciclotron, porem comparável à energia de troca

e correlação de Coulomb E_{exc} em campo magnético intenso. Por exemplo, foi proposto um estado de onda de densidade de carga induzido em poços quânticos parabólicos largos (PQW) na presença de campo magnético perpendicular em fator de preenchimento $\nu=1$. Para verificar esta possibilidade nos crescemos e medimos poços parabólicos de $Al_xGa_{1-x}As$ de tipo n e p com diferentes larguras. Nos achamos que em campo magnético perpendicular o platô de Hall e o mínimo na resistência diagonal correspondente ao fator de preenchimento $\nu=1$ estão ausentes em amostras com $W_c=1000 \text{ \AA}$. Esta observação está em acordo com o proposto na instabilidade da CDW, porém em valores mais altos de r_s que aqueles propostos no modelo teórico. Nos também encontramos que em campo magnético inclinado o efeito Hall quântico é recuperado o qual confirma o caráter cooperativo do efeito observado.

“Estudo das Instabilidades de Densidade de Spin em Nanoestruturas Semicondutoras”

Gusev, G.M.; Quivy, A.A.; Lamas, T.E.; Leite, J.R.; Estivals, O. e Portal, J.C. (High Magnetic Field Laboratory, Grenoble, France)

Recentemente, uma ampla classe de fenômenos associados com cruzamento de níveis de Landau com orientações de spin opostas tem recebido muita atenção. O interesse tem sido motivado pela estreita analogia entre estados bidimensionais (2D) no regime quântico de Hall e de ferromagnetos eletrônicos convencionais. A inclusão da interação de troca poderia conduzir a uma transição ferromagnética não polarizada de primeira ordem, quando a energia de troca torna-se maior que a separação entre sub-bandas. Estas transições de fase pertencem a uma classe de fenômenos conhecidos como ferromagnetismo quântico de Hall (QHF). Nos estudamos QHF em poços parabólicos de $Al_xGa_{1-x}As$ de tipo n e p com diferentes larguras. Nos observamos um pico na magnetorresistência transversal devido a transição paramagnético ferromagnético da primeira ordem ocorre em campo magnético inclinado, quando energia do nível de Landau de spin para cima coincide com nível de Landau de spin para baixo.

4c - Projetos de Pesquisa com Financiamento Externo:

Adalberto Fazio

Título: Projeto: “Simulação Computacional de Materiais Nanoestruturados”

Fonte: TEMÁTICO FAPESP

Montante: US\$ 170,000.00 + R\$ 205.848,00

Período de Vigência: de 1º de maio de 2002 a 30 de abril de 2006

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

Fonte: PRONEX

Montante: R\$ 250.000,00

Período de Vigência: de 2000 a 2004

André Bohomoletz Henriques

Título: “Recursos de Informática”

Fonte: PRÓ-REITORIA DE PESQUISA-USP

Montante: R\$ 3.500,00

Período da Vigência: 2003

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: de 1º de dezembro de 2000 a 31 de dezembro de 2004

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 (participante)

Montante: R\$ 70.000,00

Período de Vigência: de 2001 a 2005

Título: “Molecular-Based Synthesis of Materials: Magnetic Interactions in Nanoparticles And Films”

Laboratório de Materiais Magnéticos (IFUSP), em colaboração com a CVD Division do Institut für Neue Materialien, em Saarbruecken (Brasil/Alemanha)

Período de Vigência: de 2001 a 2005

Guennadii Michailovich Gusev

Título: “Transporte em Nanoestruturas com Forte Interação Elétron-Elétron”

CNPq/CNRS Grenoble High Magnetic Field Laboratory (Brasil/França)

Proc 69.0154/02-0

R\$8.100,00

Período de Vigência: de 2003 a 2004

Auxílio à Pesquisa

Título: “Transporte Eletrônico em Sistemas Mesoscópicos”

Fonte: FAPESP

Processo nº: 02/11210-1

Montante: R\$ 5.000,00

Período de Vigência: de 28 de fevereiro de 2003 a 28 de abril de 2004

Helena Maria Petrilli

Título: “Propriedades Eletrônicas de Biomoléculas com Potenciais Aplicações em Dispositivos Eletrônicos”. Convênio de Cooperação Bilateral CNPq/CNR (Brasil/Itália)

Processo Institucional: 69.0131/2002-0 Processo Individual: 49.0152/2003-1

Montante: R\$ 8.100,00

Período de vigência: 12 de setembro de 2003 a 28 de fevereiro de 2005

Institutos do Milênio - PADCT III

Projeto: “Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos”

Coordenador: Prof. Dr. Roberto Mendonça Faria

Fonte: CNPq

Período de Vigência: 26 de dezembro de 2001 a 26 de dezembro de 2004

Hercílio Rodolfo Rechenberg

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

Fonte: CAPES (PROCAD) USP-UNB (coordenador)

Montante: R\$ 70.000,00

Período de Vigência: de 2001 a 2005

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 2004

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

Fonte: PROJETO TEMÁTICO FAPESP

Montante: R\$ 416.700,92 + US\$ 542,928.00

Período da Vigência: de 1999 a 2003

Título: “Fabrication and Properties of Undoped and Mn-Doped Nitride Semiconductor Films Deposited by Ion Assisted Technique”

Projeto: Naval International Cooperative Opportunity in Science and Technology Program, entre o Naval Research Laboratory (USA), a Universidade de São Paulo (Brasil) e a Tokyo University of Agriculture and Technology (Japão)

Montante: US\$ 300,000.00

Período da Vigência: de 2003 a 2006

Lucy Vitória Credidio Assali

Auxílio à Pesquisa - Benefícios Complementares

Fonte: PRÓ-REITORIA DE PESQUISA-USP

Projeto: “Métodos e Algoritmos de Escala-Múltipla para Materiais”

Montante: R\$ 3.500,00

Período da Vigência: 2003

Auxílio à Reunião no Exterior

Fonte: FAPESP

Projeto: “The 22nd International Conference on Defects in Semiconductors”

Local: Aarhus, Dinamarca

Montante: R\$ 9.822,00

Período da Vigência: 2003

Marília Junqueira Caldas

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

Fonte: FAPESP

Montante: R\$ 90.186,37 + US\$ 117.904,88

Período de Vigência: de 1º de julho de 2000 a 30 de novembro de 2004

Institutos do Milênio - PADCT III

Projeto: “Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos”

Coordenador: Prof. Dr. Roberto Mendonça Faria

Fonte: CNPq

Período de Vigência: de 26.12.2001 a 26.12.2004

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

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

Fonte: TEMÁTICO FAPESP

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

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

Renato de Figueiredo Jardim

Título: “Estudos de Fenômenos Intergranulares em Óxidos Cerâmicos”

Fonte: TEMÁTICO FAPESP (Três Pesquisadores: R. Muccillo (IPEN), R.F. Jardim (IFUSP) e D. Gouvêa (EPUSP))

Montante: R\$ 254.000,00 + US\$ 217.000,00

Período da Vigência: de 2000 a 2004

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Título: Projeto Temático: “Estudos Teóricos de Propriedades Eletrônicas e Estruturais de Moléculas, Efeitos de Solventes e Fenômenos Quânticos em Biomoléculas”

Fonte: FAPESP

Processo nº: 02/01457-0

Montante: R\$ 252.170,55

Período de Vigência: de 1º de março de 2003 a 28 de fevereiro de 2006

Valmir Antônio Chitta-Nei Fernandes de Oliveira Jr.

Título: Estudos do Efeito Hall Quântico em Semicondutores Magnéticos diluídos IV - VI

Convênio CNPq/CNRS (Brasil/França)

Proc. 690147/02-3

Período de Vigência: de 2003 a 2004

4d - Estágios e Visitas Científicas:

Adalberto Fazzio

Participar de uma reunião com o Secretário da Ciência e Tecnologia.

Participar de uma discussão com os coordenadores do grupo de nanoestrutura.

Local: Ministério da Ciência e Tecnologia, Brasília, DF.

Período do Afastamento: de 23 a 25 de abril de 2003.

Participar de uma reunião no Ministério da Ciência e Tecnologia, Brasília, DF.
Período do Afastamento: de 19 a 24 de outubro de 2003.

Antônio Domingues dos Santos

Visita de colaboração científica.

Grupo do Dr. Yves Souche, no Laboratoire Louis Néel - CNRS, Grenoble, França.

Período do afastamento: de 1º a 22 de novembro de 2003.

Armando Corbani Ferraz

Participar de uma reunião na CAPES, Brasília, DF.

Data do afastamento: 02 de dezembro de 2003.

Gerardo Fabián Goya

Visita de colaboração científica.

Grupo do Prof. Dr. Sanjay Mathur, Institute für Neue Materialien, Saarbruecken, Alemanha.

Período do afastamento: de 06 a 14 de setembro de 2003.

Guennadii Michailovich Gusev

Visita de colaboração científica.

Finalidade: dar continuidade ao Projeto de Pesquisa USP/COFECUB intitulado: "Mesoscopic Transport in Semiconductor Dots and Antidots: Contribution to the Alternative Electronic Devices".

High Magnetic Field Laboratory, Grenoble, França.

Período do afastamento: de 1º de dezembro de 2002 a 22 de fevereiro de 2003.

Helena Maria Petrilli

Visita de colaboração científica.

Grupo da Profª. Dra. Elisa Molinari, Departamento de Física da Universidade de Modena, Modena, Itália e Grupo do Prof. Peter E. Blöchl, Technische Universität Clausthal, Clausthal-Zellerfeld, Alemanha.

Período do afastamento: de 07 de novembro a 02 de dezembro de 2003.

Marília Junqueira Caldas

Visita de colaboração científica.

Grupo de Nanociências, sob a coordenação da Profª. Dra. Elisa Molinari, Departamento de Física da Universidade de Modena, Modena, Itália.

Período do afastamento: de 19 de julho a 05 de agosto de 2003.

Visita de colaboração científica.

Grupo da Profª. Dra. Elisa Molinari, Departamento de Física da Universidade de Modena, Modena, Itália.

Período do afastamento: de 29 de agosto a 22 de setembro de 2003.

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

Visitas de colaboração científica.

Grupo do Prof. Dr. Yaacov Shapira, Tufts University, Massachusetts, Estados Unidos.

Grupo do Prof. Dr. Simon Foner, Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts, Estados Unidos.

Período do afastamento: de 1º a 09 de março de 2003.

Visitas de colaboração científica.

Grupo do Prof. Dr. Yaacov Shapira, Tufts University, Massachusetts, Estados Unidos.

Grupo do Prof. Dr. Simon Foner, Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts, Estados Unidos.

Período do afastamento: de 11 a 20 de setembro de 2003.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Visita de colaboração científica.

Grupo do Prof. Yngve Öhrn, Quantum Theory Project, Universidade da Flórida, Flórida, Estados Unidos.

Período do afastamento: de 21 de fevereiro a 08 de março de 2003.

Participar de uma reunião no CNPq, Brasília, DF.

Data do afastamento: 23 de abril de 2003.

Participar de uma reunião na CAPES, Brasília, DF.

Período do afastamento: 23 a 25 de maio de 2003.

Participar de uma reunião do Comitê Assessor de Física/Astronomia.

CNPq, Brasília, DF.

Período do afastamento: 22 a 27 de junho de 2003.

Visita de colaboração científica.

Grupo do Prof. Sten Lunell, Universidade de Uppsala, Uppsala, Suécia.

Período do afastamento: 21 a 30 de outubro de 2003.

4e - Participação em Reuniões Científicas Internacionais:

Adalberto Fazzio

11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics

Fortaleza, Ceará

Período: de 08 a 14 de março de 2003

2nd Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures Materials (NanoSemiMat-2), Natal, Rio Grande do Norte

Período: de 03 a 04 de abril de 2003

Euroconference on Spin and Charge Transport in Nanostructures, Universidade do Minho
Braga, Portugal
Período: de 1^o a 05 de setembro de 2003

22nd European Conference on Surface Science - ECOSS-22
Praga, República Tcheca
Período: de 07 a 12 de setembro de 2003

André Bohomoletz Henriques
11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics
Fortaleza, Ceará
Período: de 09 a 14 de março de 2003

Antônio Domingues dos Santos
2nd American Symposium on Scanning Probe Microscopy
Búzios, Rio de Janeiro
Período: de 05 a 09 de abril de 2003

Antônio José Roque da Silva
2003 Nanotechnology Conference and Trade Show
San Francisco, Califórnia, Estados Unidos
Período: de 23 a 27 de fevereiro de 2003

Annual APS March Meeting 2003
Austin, Texas, Estados Unidos
Período: de 03 a 07 de março de 2003

22nd International Conference on Defects in Semiconductors
Aarhus, Dinamarca
Período: de 26 de julho a 03 de agosto de 2003

Armando Corbani Ferraz
22nd European Conference on Surface Science - ECOSS-22
Praga, República Tcheca
Período: de 07 a 12 de setembro de 2003

9th International Conference on the Formation of Semiconductor Interfaces - ICFSI-9
Madrid, Espanha
Período: de 15 a 19 de setembro de 2003

Gerardo Fabián Goya
10th International Symposium on Metastable, Mechanically Alloyed and Nanocrystalline Materials and II Workshop on Metastable and Nanostructured Materials
Foz do Iguaçu, Paraná

Período: de 24 a 30 de agosto de 2003

4th International Conference on Mechanochemistry and Mechanical Alloying - INCOME 2003

Saarbruecken, Alemanha

Período: de 06 a 11 de setembro de 2003

Guennadii Michailovich Gusev

2nd Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures (NanoSemiMat-2)

Natal, Rio Grande do Norte

Período: de 03 a 04 de abril de 2003

15th International Conference on Electronic Properties of two-Dimensional Systems-EP2DS, Nara, Japão

Período: de 11 a 20 de julho de 2003

Hercílio Rodolfo Rechenberg

International Conference on Magnetism - ICM'2003

Roma, Itália

Período: de 25 de julho a 02 de agosto de 2003

José Roberto Leite

11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics

Fortaleza, Ceará

Período: de 09 a 14 de março de 2003

2nd Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures Materials (NanoSemiMat-2), Natal, Rio Grande do Norte

Período: de 03 a 04 de abril de 2003

II Brazil-Materials Research Society Meeting

Rio de Janeiro, Rio de Janeiro

Período: de 27 a 28 de outubro de 2003

Lucy Vitória Credídio Assali

11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics

Fortaleza, Ceará

Período: de 09 a 14 de março de 2003

22nd International Conference on Defects in Semiconductors

Aarhus, Dinamarca

Período: de 26 de julho a 02 de agosto de 2003

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics

Fortaleza, Ceará

Período: de 09 a 14 de março de 2003

III Taller Iberoamericano sobre Nanoestructuras con Aplicaciones en Micro y Optoeletrónica (NANO 2003)

Madrid, Espanha

Período: de 22 a 29 de março de 2003

2nd Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures (NanoSemiMat-2)

Natal, Rio Grande do Norte

Período: de 03 a 04 de abril de 2003

II Brazil-Materials Research Society Meeting

Rio de Janeiro, Rio de Janeiro

Período: de 27 a 28 de outubro de 2003

2003 MRS Fall Meeting”

Boston, Estados Unidos

Período: de 29 novembro a 03 de dezembro de 2003

Marília Junqueira Caldas

11th International Workshop on Computational Physics and Material Science: Total Energy and Force Methods, Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics (ICTP)

Trieste, Itália

Período: 16 a 18 de Janeiro de 2003

22nd International Conference on Defects in Semiconductors

Aarhus, Dinamarca

Período: de 26 de julho a 03 de agosto de 2003

Modelling Electronic Processes in Molecular Scale Devices, European Centre for Atomic and Molecular Computations, Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire (CECAM)

Lyon, França

Período: 15 a 17 de setembro de 2003

II Encontro da SBPMat Brazilian MRS Meeting 2003

Rio de Janeiro, Rio de Janeiro

Período: de 26 a 29 de outubro de 2003

Renato de Figueiredo Jardim

International Workshop on Unconventional Superconductors

Instituto de Física da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP

Período: de 20 a 23 de maio de 2003

7th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors
Rio de Janeiro, Rio de Janeiro
Período: de 27 a 28 de maio de 2003

Sylvio Roberto Accioly Canuto
2003 Sanibel Symposium
Saint Augustine, Florida, Estados Unidos
Período: de 22 de fevereiro a 1^o de março de 2003

School on Simulation Physics e apresentar a palestra “Simulação Computacional de Líquidos. Propriedades Eletrônicas”
Ouro Preto, Minas Gerais
Período: de 12 a 16 de agosto de 2003

XVth International Conference on Horizons in Hydrogen Bond Research
Berlin, Alemanha
Período: de 14 a 22 de setembro de 2003

International Symposium in Honour to Prof. Osvaldo Goscinski; Universidade de Uppsala
Uppsala, Suécia
Período: de 21 a 30 de outubro de 2003

4f - Participação em Reuniões Científicas Nacionais:

Adalberto Fazzio
XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada
Caxambú, Minas Gerais
Período: de 06 a 10 de maio de 2003

Encontro Anual de Acadêmicos, Academia Brasileira de Ciências
Rio de Janeiro, Rio de Janeiro
Data: 06 de junho de 2003

55^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira para o Progresso da Ciência - SBPC
Recife, Pernambuco
Período: de 13 a 18 de julho de 2003

XXI Encontro de Físicos do Norte e Nordeste
Fortaleza, Ceará
Período: de 03 a 07 de novembro de 2003

Workshop sobre Simulação e Modelagem de Nanoestruturas
Brasília, Distrito Federal

Período: de 02 a 05 de dezembro de 2003

XI Latin American Congress of Surface Science and its Applications – XI CLACSA
Pucón, Chile

Período: de 07 a 12 de dezembro de 2003

Antônio Domingues dos Santos

XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada
Caxambú, Minas Gerais

Período: de 06 a 09 de maio de 2003

II Reunião dos Integrantes da Rede de Nanotecnologia Molecular e de Interfaces - II
RENAMI

Búzios, Rio de Janeiro

Período: de 03 a 05 de agosto de 2003

IV Escola Brasileira de Magnetismo - EBM, na Universidade Federal de São Carlos
São Carlos, São Paulo

Período: de 27 a 28 de novembro de 2003

Antônio José Roque da Silva

XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada
Caxambú, Minas Gerais

Período: de 06 a 10 de maio de 2003

Workshop sobre Simulação e Modelagem de Nanoestruturas
Brasília, Distrito Federal

Período: de 02 a 05 de dezembro de 2003

Carmen Silvia de Moya Partiti

XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada
Caxambú, Minas Gerais

Período: de 06 a 10 de maio de 2003

Ewout Ter Haar

XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada
Caxambú, Minas Gerais

Período: de 06 a 10 de maio de 2003

Gerardo Fabián Goya

XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada
Caxambú, Minas Gerais

Período: de 06 a 10 de maio de 2003

Helena Maria Petrilli

Segundo Encontro de Trabalho do Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos – Institutos do Milênio - CNPq
Atibaia, São Paulo
Período: de 13 a 17 de abril de 2003

XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada
Caxambú, Minas Gerais
Período: de 06 a 10 de maio de 2003

Hercílio Rodolfo Rechenberg

XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada
Caxambú, Minas Gerais
Período: de 06 a 10 de maio de 2003

Encontro Jacques Danon de Espectroscopia Mössbauer
Maringá, Paraná
Período: de 11 a 13 de novembro de 2003

José Roberto Leite

XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada
Caxambú, Minas Gerais
Período: de 06 a 10 de maio de 2003

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada
Caxambú, Minas Gerais
Período: de 06 a 10 de maio de 2003

Marília Junqueira Caldas

Segundo Encontro de Trabalho do Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos – Institutos do Milênio - CNPq
Atibaia, São Paulo
Período: de 13 a 17 de abril de 2003

XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada
Caxambú, Minas Gerais
Período: de 06 a 10 de maio de 2003

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada
Caxambú, Minas Gerais
Período: de 06 a 10 de maio de 2003

Sylvio Roberto Accioly Canuto

XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada

Caxambú, Minas Gerais
Período: de 06 de a 10 de maio de 2003

XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica
Caxambu, Minas Gerais
Período: de 23 a 26 de novembro de 2003

I Workshop em Física Molecular e Espectroscopia
Niterói, Rio de Janeiro
Período: de 28 a 29 de novembro de 2003

5 - PRODUÇÃO CIENTÍFICA

5a - Trabalhos Apresentados em Eventos Internacionais:

1. ALVES, H.W.L.; ALVES, J.L.A.; SANTOS, A.M.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE J.R. - "Ab Initio Calculation of the (100) and (110) Surface Phonon Dispersion of GaAs and GaN". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
2. ALVES, H.W.L.; ALVES, J.L.A.; SANTOS, A.M.; SCOLFARO, L.M.R. e LEITE, J.R. - "Strain-induced Shifts of the Zone-Center Phonons of III-Nitrides". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
3. ANDRADE, S.; FONSECA, F.C.; JARDIM, R.F.; BOSSI, I.; TORIKACHVILI, M.S.; LACERDA, A.H. and BEN-DOR, L. - "Superconductivity in Magnetically Ordered $Ru_{1-x}Ir_xSr_2GdCu_2O_8$ Compounds". In: *International Workshop on Unconventional Superconductivity* - Instituto de Física da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, São Paulo (2003).
4. ANJOS, V.; BELL, M.J.V. and LEITE, J.R. - "Raman Spectroscopy of n-GaN in Cubic Phase". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
5. ASSALI, L.V.C.; MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F. - "An Ab Initio Investigation on the Structural and Electronic Properties of Ti Impurities in Silicon, Diamond, and Silicon Carbide". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
6. ASSALI, L.V.C.; MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F. - "Transition Metal Impurities in 3C-SiC and 2H-SiC". In: *22nd International Conference on Defects in Semiconductors*, Aarhus, Dinamarca, (2003).

7. AYRES, F.; ASSALI, L.V.C.; MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F. - "A First Principles Investigation of Mercuric Iodide: Bulk Properties and Intrinsic Defects". In: 11th *Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
8. AYRES, F.; MACHADO, W.V.M.; JUSTO, J.F. and ASSALI, L.V.C. - "Defects in Mercuric Iodide: na APW Investigation". In: 22nd *International Conference on Defects in Semiconductors*, Aarhus, Dinamarca (2003).
9. BECERRA C.C. - "Magnetic Structure and Remanent Magnetization in $\text{CsMnX}_{3,2}\text{D}_{20}$ (X=Cl,Br)". In: *International Conference on Magnetism - ICM*, Roma, Itália (2003).
10. BECERRA C.C.; PADUAN Filho, A.; PALACIO, F.; CAMPO, J. and DEFOTIS, G. - "Field Dependence of the Susceptibility of Ferromagnets close to the Curie Point and its Relation with the Gap Critical Exponents of the Scaling Function". In: *International Conference on Magnetism - ICM*, Roma, Itália (2003).
11. BOSELLI, M.A.; CUNHA LIMA, I.C. da; LEITE, J.R.; TROPER, A. and GHAZALI, A. - "Ferromagnetic Order In The Cubic Metallic Phase of a (Ga, Mn) N: Monte Carlo Simulation". In: 2nd *Brazil Materials Research Society Meeting*, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro (2003).
12. BOSELLI, M.A.; CUNHA LIMA, I.C. da; ZEVALLOS, A.M.O. de; PINTO, R.C.; SOARES, J.A.N.T.; CHITTA, V.A.; and LEITE, J.R. - "Influence Of Mn Distribution On The Shottky Barrier Of Ion Implanted (Ga,Mn)N Thin Films". In: 2nd *Brazil Materials Research Society Meeting*, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro (2003).
13. BRITO MOTA, F. de; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Ab Initio Study of Beta-Si₃N₄ (001) Surface: Electronic and Structural Properties". In: 11th *Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
14. BUSSI, G.; RUINI, A.; CALDAS, M.J. and MOLINARI, E. - "Ab Initio Optical Properties of Conjugated Polymers: the Role of Interchain Interaction". In: 11th *International Workshop on Computational Physics and Material Science: Total Energy and Force Methods*, in the Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics, Miramare, Trieste, Itália (2003).
15. CAMPO, J.; PALACIO, F.; BECERRA C.C. and PADUAN Filho, A. - "Magnetic Structure of $\text{CsMnX}_{3,2}\text{D}_{20}$ (X=Cl,Br): A New Step to Understand the Origin of the Remanent Magnetization". In: 3rd *European Conference on Neutron Scattering*, Montpellier, France (2003).

16. CANUTO, S. - "Modeling Molecules in the Liquid Environment". In: *15th International Conference on Horizons in Hydrogen Bond Research*, Berlim, Alemanha (2003).
17. CANUTO, S. and COUTINHO, K. - "Solvents as Explicit Liquids using a Sequential Monte Carlo-Quantum Mechanics Methodology". In: *2003 Sanibel Symposium*, St. Augustine, Florida, Estados Unidos (2003).
18. CASTRO, G.M.B.; RODRIGUES, A.R.; MACHADO, F.L.A. and JARDIM, R.F. - "Evidence of Dynamical Phase Separation in $\text{La}_{0.6}\text{Y}_{0.1}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ Manganite". In: *International Conference on Magnetism - ICM*, Roma, Itália (2003).
19. DALPIAN, G.M.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Mn Impurities in Si: Stability on Bulk and on Surface". In: *22nd International Conference on Defects in Semiconductors*, Aarhus, Dinamarca (2003).
20. DALPIAN, G.M.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Adsorption and Incorporation of Mn on Si(100)". In: *22nd European Conference on Surface Science - ECOSS-22*, Praga, República Tcheca (2003).
21. DALPIAN, G.M.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Adsorption of Si and Ge in Monoatomic Si(100) Steps". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
22. DALPIAN, G.M.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Mn Impurities in Si: Stability on Bulk and on Surface". In: *22nd International Conference on Defects in Semiconductors*, Aarhus, Dinamarca (2003).
23. DEACON, R.; NICHOLAS, R.J.; MASON, N.J. and HENRIQUES, A.B. - "Low Temperature Magnetoresistance of Strongly Coupled Superlattices". In: *15th International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems*, Nara, Japão (2003).
24. FAGAN, S.B.; MOTA, R.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Fe and Mn Atoms Interacting with Carbon Nanotubes". In: *22nd International Conference on Defects in Semiconductors*, Aarhus, Dinamarca (2003).
25. FAZZIO, A. - "On the Nature of Mn in Semiconductors". In: *Congreso Latinoamericano de Ciencias de Superficies y sus Aplicaciones - CLACSA 2003*, Pucón, Chile (2003).
26. FAZZIO, A.; SILVA, A.J.R. da; FAGAN, S.B. and MOTA, R. - "First-Principles Study of Transition Metal Atoms Interacting with Single-Wall Carbon Nanotubes". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
27. FERLAUTO, A.S.; ALVAREZ, F.; FONSECA, F.C.; GOYA, G.F. and JARDIM, R.F. - "Structural and Magnetic Properties of C-Ni Thin-Film Nanocomposites". In: *10th International Symposium on Metastable*,

- Mechanically Alloyed, and Nanocrystalline Materials*, Foz do Iguaçu, Paraná (2003).
28. FERNANDEZ, J.R.L.; CERDEIRA, F.; MENESES, E.A.; SOARES, J.A.N.T.; SANTOS, A.M.; NORIEGA, O.C.; LEITE, J.R.; AS, D.J.; KÖHLER, U.; SALAZAR, D.G.P.; SCHIKORA, D. And LISCHKA, K. - "Optical Properties Of Cubic GaN With and Without Carbon Doping". In: *2nd Brazil Materials Research Society Meeting*, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro (2003).
 29. FERNANDEZ, J.R.L.; NORIEGA, O.C.; SOARES, J.A.N.T.; TABATA, A.; RODRIGUES, S.C.P.; CERDEIRA, F.; MENESES, E.A.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; AS, D.J. and LISCHKA, K. - "Near Band-Edge Optical Properties of Cubic GaN". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
 30. FERRAZ, A.C. and MIOTTO, R. - "Adsorption and Decomposition of Acetone on the Si (001) Surface". In: *9th International Conference on the Formation of Semiconductor Interfaces - ICFSI-9*, Madrid, Espanha (2003).
 31. FERRETTI, A.; BUSSI, G.; RUINI, A.; MOLINARI, E. and CALDAS, M.J. - "Electronic Properties of Polymer Crystals: The Effect of Interchain Interactions". In: *22nd International Conference on Defects in Semiconductors*, Aarhus, Dinamarca (2003).
 32. FRANCO, D.R.; IMBERNON, R.A.L.; BERQUÓ, T.S.; ENZWEILLER, J. and PARTITI, C.S.M. - "Magnetic and Structural Characterization of Iron-Bearing Phases in Sedimentos from Taiacupeba Urban Supply Lake, São Paulo. In: *3rd Latinoamerican Congress on Sedimentology*, Belém, Pará. Abstracts, 89 (2003).
 33. GOUVEA-ALCAIDE, E.; MUÑE, P. and JARDIM, R.F. - "Effects of Uniaxial and Isostatic Compacting Pressures on the $J_c(B_a)$ Behavior in $Bi_{1.65}Pb_{0.35}Sr_2Ca_2Cu_3O_y$ Compounds". In: *7th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors*, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro (2003).
 34. GOUVEA-ALCAIDE, E.; MUÑE, P. and JARDIM, R.F. - "Inhomogeneous Distribution of Uniaxial Compacting Pressure and its Effects on Transport Properties of $Bi_{1.65}Pb_{0.35}Sr_2Ca_2Cu_3O_y$ Superconductors". In: *7th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors*, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro (2003).
 35. GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; LEITE, J.R. and PORTAL, J.C. - "Anomalous Hall Effect in a Two-Dimensional Hole System". In: *27th International Conference on the Physics of Semiconductors*, Flagstaff, AZ, Estados Unidos (2003).

36. GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; LEITE, J.R.; ESTIBALS, O. and PORTAL, J.C. - "Quantum Hall Ferromagnet in a Parabolic Well for Spintronic Applications". In: *2nd Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures Materials – NanoSemiMat-2*, Natal, Rio Grande do Norte (2003).
37. GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; LEITE, J.R.; ESTIBALS, O. and PORTAL, J.C. - "Transport of the Quasi-Three-Dimensional Hole Gas in a Magnetic Field in the Ultra-Quantum Limit". In: *15th International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems*, Nara, Japão (2003).
38. GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; LEITE, J.R.; ESTIBALS, O. and PORTAL, J.C. - "Transport Properties of the Quantum Hall Ferromagnet in a Parabolic Wells". In: *15th International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems*, Nara, Japão (2003).
39. GUSEV, G.M.; SÉRGIO, C.S.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; LEITE, J.R.; ESTIBALS, O. and PORTAL, J.C. - "Charge Density Wave Instability in a Parabolic Well in Perpendicular Magnetic Field". In: *15th International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems*, Nara, Japão (2003).
40. HANAMOTO, L.K.; HENRIQUES, A.B.; OLIVEIRA RAPPL, P.H. de; OLIVEIRA Jr., N.F.; UETA, A.Y. and ABRAMOF, E. - "Excitonic Absorption in $Pb_xEu_{1-x}Te$ Magnetic Semiconductors". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
41. HENRIQUES, A.B. and NICHOLAS, R.J. - "Monte Carlo Study of Miniband Conduction in Type-II Superlattices". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
42. LAMAS, T.E.; QUIVY, A.A.; MARTINI, S.; SILVA, M.J. da and LEITE, J.R. - "Carbon Doping of (100) and (311)A GaAs Layers Grown by Molecular Beam Epitaxy". In: *12th EURO-MBE Workshop*, Bad Hofgastein, Áustria (2003).
43. LAMAS, T.E.; QUIVY, A.A.; MARTINI, S.; SILVA, M.J. da and LEITE, J.R. - "Carbon Doping of GaAs and AlGaAs Layers Grown on (100) and (311)A Substrates by Molecular Beam Epitaxy". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
44. LAMAS, T.E.; QUIVY, A.A.; SÉRGIO, C.S.; GUSEV, G.M.; MARTINI, S.; SILVA, M.J. da and LEITE, J.R. - "Growth of High Hole-Mobility Parabolic Quantum Wells on (311)A GaAs Substrates". In: *12th EURO-MBE Workshop*, Bad Hofgastein, Áustria (2003).
45. LARICO, R.; JUSTO, J.F.; MACHADO, W.V.M. and ASSALI, L.V.C. - "An Ab Initio Investigation on Nickel Impurities in Diamond". In: *22nd*

- International Conference on Defects in Semiconductors*, Aarhus, Dinamarca (2003).
46. LARICO, R.; MACHADO, W.V.M.; JUSTO, J.F. and ASSALI, L.V.C. - "Nickel Impurities in Diamond: a First Principles Investigation". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
 47. LEITE ALVES, H.W.; ALVES, J.L.A.; SANTOS, A.M.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Strain-Induced Shifts of the Zone-Center Phonons of III-Nitrides". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
 48. LEITE, J.R.; L.K. TELES, L.K.; FERREIRA, L.G. and SCOLFARO, L.M.R. - "Effects of Biaxial Strain on the Formation of Ordered Phases in Cubic InGaN". In: *Materials Research Society - MRS Fall Meeting*, Boston, Estados Unidos (2003).
 49. LEÓN-PÉREZ, F. de and FERRAZ, A.C. - "A Theoretical Study of Acrylonitrile Adsorption on Si(001)-2x1". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
 50. MÉLO; A.M.; CALDAS, M.J.; PETRI, A. and LIMA, N.A. - "Oligomer Deposition in One Dimension". In: *VII Latin American Workshop on NonLinear Phenomena - LAWNP'03*, Salvador, Bahia (2003).
 51. MIOTTO, R. and FERRAZ, A.C. - "A Comparative Study of the Interaction of Cyclopentene, Cyclohexene and 1,4-Cyclohexadiene with the Silicon (001) Surface". In: *22nd European Conference on Surface Science - ECOSS-22*, Praga, República Tcheca (2003).
 52. MIOTTO, R. and FERRAZ, A.C. - "Acetonitrile Adsorption on the Silicon (001) Surface". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
 53. MIOTTO, R.; FERRAZ, A.C. and SRIVASTAVA, G.P. - "Adsorption of Maleic Anhydride on the Silicon (001) Surface". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
 54. MIRANDA, C.R.; ANTONELLI, A.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Vacancies in Amorphous Silicon: A First Principles Study". In: *22nd International Conference on Defects in Semiconductors*, Aarhus, Dinamarca (2003).
 55. MIWA, R.H.; MIOTTO, R. and FERRAZ, A.C. - "In-Rich InAs (001) Surface: An Ab Initio Study". In: *22nd European Conference on Surface Science - ECOSS-22*, Praga, República Tcheca (2003).
 56. MIWA, R.H.; VENEZUELA, P. and FAZZIO, A. - "Stacking Faults and Vacancies in Si_xGe_{1-x}". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).

57. MONTE, A.F.G.; SOLER, M.A.G.; SILVA, S.W. da; MORAIS, P.C.; QUIVY, A.A. MARTINI, S. and LEITE, J.R. - "Carrier Diffusion in InGaAs/GaAs (001) Substrates". In: *5th International Workshop on Epitaxial Semiconductors on Patterned Substrates and Novel Index Surfaces - ESPS-NIS*, Stuttgart, Alemanha (2003).
58. OLIVEIRA, R.F.; HENRIQUES, A.B.; LAMAS, T.E.; QUIVY, A.A.; PIRES, M.P.; SOUZA, P.L. and YAVICH, B. - "Luminescence from Miniband States in Heavily Doped Superlattices". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
59. ORELLANA, W.; MIWA, R.H. and FAZZIO, A. - "Carbon Nanotube Adsorbed on Si(001)". In: *22nd European Conference on Surface Science - ECOSS-22*, Praga, República Tcheca (2003).
60. ORELLANA, W.; MIWA, R.H. and FAZZIO, A. - "Carbon Nanotube on Si(100): Structural and Electronic Properties". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
61. ORELLANA, W.; MIWA, R.H. and FAZZIO, A. - "Carbon Nanotubes Adsorbed on Clean and Hydrogenated Si(001) Surface". In: *Congreso Latinoamericano de Ciencias de Superficies y sus Aplicaciones - CLACSA 2003*, Pucón, Chile (2003).
62. ORELLANA, W.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Energetic of Nitridation Processes in SiO₂". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
63. PAIVA, R. de; ALVES, J.L.A.; NOGUEIRA, R.A.; LEITE, J.R. and SCOLFARO, L.M.R. - "First Principles Materials Study for Spintronics: MnAs and MnN". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
64. PAIVA, R. de; ALVES, J.L.A.; NOGUEIRA, R.A.; LEITE, J.R. and SCOLFARO, L.M.R. - "Diluted Magnetic Ga_{1-x}Mn_xN Alloys: a First Principles Study". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
65. PALACIO, F.; CAMPO, J.; BECERRA C.C.; PADUAN Filho, A. and DEFOTIS, G. - "A Molecular Ferromagnet Exhibiting Field Induced Critical Fluctuations". In: *American Physical Society March Meeting*, Austin, Texas, Estados Unidos: APS proceedings (2003).
66. QUIVY, A.A.; MARTINI, S.; LAMAS, T.E.; SILVA, M.J. da; SILVA, E.C.F. da and LEITE, J.R. - "Segregation of In Atoms during Strained and Unstrained Epitaxy of InGaAs on (001) Surfaces". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
67. RODRIGUES, S.C.P.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; SIPAHI, G.M.; CUNHA LIMA, I.C. da and BOSELLI, M.A. - "(Ga, Mn) N-Based

- Ferromagnetic Superlattices: Electronic Properties”. In: *2nd Brazil Materials Research Society Meeting*, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro (2003).
68. RODRIGUES, S.C.P.; SIPAHI, G.M.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R.; - “Electronic and Optical Properties of AlGaN/GaN Superlattices under Electric Fields”. In: *2nd Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures Materials - NanoSemiMat-2*, Natal, Rio Grande do Norte (2003).
69. RUINI, A.; BUSSI, G.; FERRETTI, A.; MOLINARI, E. and CALDAS, M.J. - “First-principles Analysis of Optoelectronic Properties in Semiconducting Polymers: The Role of Solid-State Packing”. In: *Modelling Electronic Processes in Molecular Scale Devices, no European Centre for Atomic and Molecular Computations - Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire - CECAM*, Lyon, França (2003).
70. SALES, F.V. de; SILVA, S.W. da; CRUZ, J.M.R.; MONTE, A.F.G.; SOLER, M.A.G.; MORAIS, P.C.; SILVA, M.J. da; QUIVY, A.A. and LEITE, J.R. - “Energy Transfer in Small Lens-Shaped InAs Quantum Dots Observed by Microluminescence Image”. In: *1st International Meeting on Applied Physics - APHYS 2003*, Badajoz, Espanha (2003).
71. SANDIM, M.J.R. and JARDIM, R.F. - Thermopower and Electrical Resistance of Granular $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$ Superconductors”. In: *7th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors*, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro (2003).
72. SCHMIDT, T.M.; ARANTES, J.T. and FAZZIO, A. - “The Interaction of Point Defects with a 90° Partial Dislocation in Si”. In: *22nd International Conference on Defects in Semiconductors*, Aarhus, Dinamarca (2003).
73. SCOLFARO, L.M.R. - “InAlGaN Quaternary Alloys: The Energetics and Thermodynamic Properties”. In: *2nd Brazil Materials Research Society Meeting*, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro (2003).
74. SCOLFARO, L.M.R.; MARQUES, M.; TELES, L.K.; FERREIRA, L.G. and LEITE, J.R. - “Structural, Energy Gap, and Thermodynamic Properties of $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{N}$ ”. In: *Materials Research Society - MRS Fall Meeting*, Boston, Estados Unidos (2003).
75. SCOPEL, W.L.; FANTINI, M.C.A.; PRADO, R.J.; ORELLANA, W.; SILVA, A.J.R. da; FAZZIO, A. and PEREYRA, I. - “Experimental and Theoretical Local Structure of Oxygen-Rich Amorphous Silicon Oxynitride”. In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
76. SILVA, A.J.R. da; CARRIJO FARIA, J.; SILVA, E.Z. da and FAZZIO, A. - “Adsorption of Gold Atoms on Carbon Nanotubes”. In: *Nanotechnology*

- Conference and Trade Show - NanoTech 2003*, San Francisco, California, Estados Unidos (2003).
77. SILVA, A.J.R. da; CARRIJO FARIA, J.; SILVA, E.Z. da and FAZZIO, A. - "Adsorption of Gold Atoms on Carbon Nanotubes". In: *Nanotechnology Conference and Trade Show - NanoTech 2003*, San Francisco, California, Estados Unidos (2003).
78. SILVA, A.J.R. da; FARIA, J.C.; SILVA, E.Z. da and FAZZIO, A. - "Adsorption of Gold Atoms on Carbon Nanotubes". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
79. SILVA, A.J.R. da; FAZZIO, A.; SANTOS, R.R. dos and OLIVEIRA, L.E. - "First-Principles Study of Mn Interstitial and Nature of Hole-Mediated Ferromagnetism in $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ ". In: *22nd International Conference on Defects in Semiconductors*, Aarhus, Dinamarca (2003).
80. SILVA, A.J.R. da; NOVAES, F.D.; SILVA, E.Z. da and FAZZIO, A. - "Effect of Impurities in the Breaking of Gold Nanowires". In: *Nanotechnology Conference and Trade Show - NanoTech 2003*, San Francisco, California, Estados Unidos (2003).
81. SILVA, A.J.R. da; NOVAES, F.D.; SILVA, E.Z. da and FAZZIO, A. - "Effect of Impurities in the Breaking of Gold Nanowires". In: *American Physical Society March Meeting*, Austin, Texas, Estados Unidos: APS proceedings (2003).
82. SILVA, E.Z. da; NOVAES, F.D.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Effect of Impurities in Gold Nanowires". In: *Congreso Latinoamericano de Ciencias de Superficies y sus Aplicaciones - CLACSA 2003*, Pucón, Chile (2003).
83. SILVA, E.Z. da; NOVAES, F.D.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Effect of Impurities in Gold Nanowires". In: *Euroconference on Spin and Charge Transport in Nanostructures*, Braga, Portugal (2003).
84. SILVA, E.Z. da; NOVAES, F.D.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Effect of Impurities on the Breaking of Au Nanowires". In: *22nd European Conference on Surface Science - ECOSS-22*, Praga, República Tcheca (2003).
85. SILVA, M.J. da; MARTINI, S.; LAMAS, T.E.; QUIVY, A.A.; SILVA, E.C.F. da and LEITE, J.R. - "InAs/GaAs Quantum Dots Designed for Long-Wavelength Applications". In: *12th EURO-MBE Workshop*, Bad Hofgastein, Áustria (2003).
86. SILVA, M.J. da; MARTINI, S.; LAMAS, T.E.; QUIVY, A.A.; SILVA, E.C.F. da and LEITE, J.R. - "Large InAs/ GaAs Quantum Dots Optically Active in the Long-Wavelength Region". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).

87. SIPAHI, G.M.; CUNHA LIMA, I.C. da; BOSELLI, M.A.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R. and RODRIGUES, S.C.P. - "Electronic Properties of GaMnAs Diluted Magnetic Semiconductors". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
88. SIPAHI, G.M.; CUNHA LIMA, I.C. da; BOSELLI, M.A.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R. and RODRIGUES, S.C.P. - "Electronic Properties of GaMnAs Diluted Magnetic Semiconductors". In: *2nd Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures Materials - NanoSemiMat-2*, Natal, Rio Grande do Norte (2003).
89. SOTOMAYOR CHOQUE, N.M.; GUSEV, G.M. and LEITE, J.R. - "Evolution from Commensurability to Size-Effects Structures in Three-Dimensional Billiards". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
90. TELES, L.K.; FERREIRA, L.G.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Strain Effects on Coherent Cubic InGaN and the Formation of Ordered Phases". In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
91. TELES, L.K.; FERREIRA, L.G.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Ordering in Al_xGa_{1-x}N alloys". In: *Materials Research Society - MRS Fall Meeting*, Boston, Estados Unidos (2003).
92. TELES, L.K.; MARQUES, M.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R. and FERREIRA, L.G. - "Phase Separation and Ordering in group-III Nitride Alloys" In: *11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, Fortaleza, Ceará (2003).
93. TORIKACHVILI, M.S.; BOSSI, I.; O'BRIEN, J.R.; FONSECA, F.C.; MUCCILLO, R. and JARDIM, R.F. - "Superconductivity and Magnetism in Ru_{1-x}Ir_xSr₂GdCu₂O₈ Compounds". In: *7th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors*, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro (2003).

5b - Trabalhos Apresentados em Eventos Nacionais:

1. ALVES, C.R.; DEPEYROT, J.; SOUZA, M.H.; TOURINHO, F.A.; GOYA, G.F. e RECHENBERG, H.R. - "Investigações Experimentais à Baixas Temperaturas de Efeitos de Tamanho/Interface em Nanopartículas de CuFe₂O₄ utilizadas na Elaboração de Fluidos Magnéticos". In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.

2. ALVES, H.W.L.; ALVES, J.L.A.; SCOLFARO, L.M.R. e LEITE, J.R. - "Ab Initio Calculation of the (100) and (110) Surface Phonon Dispersion of GaAs and GaN". In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
3. ANDRADE, S.; JARDIM, R.F. e ESCOTE, M.T. - "Medidas de Resistividade Elétrica sob Pressão ρ (T, P) nas Amostras Cerâmicas do Tipo NdNiO_3 e $\text{Nd}_{0.65}\text{Eu}_{0.35}\text{NiO}_3$ ". In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
4. BAIERLE, R.J.; PIQUINI, P.; SCHMIDT, T.M. e FAZZIO, A. - "Theoretical Study of Natives Defects in BN-Nanotubes". In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
5. BARRA-BARRERA, A.D.; SANTOS, A.D.; AMARAL, L. e SAMPAIO, L. - "Estudo do Efeito das Implantações de Íons de He, Ne e Ar em Filmes Finos de NiFe/FeMn. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
6. BORIN, A.C.; SERRANO-ANDRÉS, L.; LUDWIG, V. e CANUTO, S. - "The UV Absorption Spectrum of Benzotriazole Tautomers". In: *XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica*, Caxambu, Minas Gerais, de 23 a 26 de novembro de 2003.
7. CALDAS, M.J.; MÉLO, A.M. e PETRI, A. - "Automontagem de Oligômeros em Redes Unidimensionais". In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
8. CALDAS, M.J.; RUINI, A.; FERRETTI, A.; BUSSI, G. e MOLINARI, E. - "Solid State Effects on the Electronic and Optical Properties of Phenylenevinylene". In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
9. CARNEIRO; A.S.; FONSECA, F.C.; JARDIM, R.F.; KIMURA, T. - "Relaxation Effects on Cr doped $\text{Nd}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$ Manganites". In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
10. DALPIAN, G.M.; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - "Mn Adsorption on Si(100): Structural, Electronic and Magnetic Properties". In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
11. DÁVILA, L.Y.A. e CALDAS, M.J. - "Study of Geometric Properties of Crystalline Biphenyl". In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.

12. ESCOLTE, M.T.; PONTES, F.M.; LEITE, E.R.; LONGO, E. e JARDIM, R.F. - “Structural and Electrical Properties of PZT Thin Films after annealing under Oxygen Pressure”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
13. FARIA, J.C.; CARVALHO, M.R.; SILVA, A.J.R. da; SILVA, E.Z. da e FAZZIO, A. - “Adsorption of Gold on Carbon Nanotubes”. In: *XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica*, Caxambu, Minas Gerais, de 23 a 26 de novembro de 2003.
14. FARIA, J.C.; SILVA, A.J.R. da ; FAZZIO, A. e SILVA, E.Z. da - “Adsorption of Gold Atoms on Carbon Nanotubes”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
15. FERNANDEZ, J.R.L.; CERDEIRA, F.; MENESES, E.A.; BRASIL, M.J.S.P.; SOARES, J.A.N.T.; SANTOS, A.M.; NORIEGA, O.C.; LEITE, J.R., AS, D.J.; KÖHLER, U.; SALAZAR, D.G.P.; SCHIKORA, D. e LISCHKA, K. - “Optical Properties of Cubic GaN with and without Carbon Doping”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
16. FRANCO, D.R.; IMBERNON, R.; BERQUÓ, T.S.; PARTITI, C.S.M. e ENZWEILER, J. - “Establishment of a Mössbauer Procedure of Spectral Analysis for Sediments from Water Urban Supply Systems”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
17. FROTA-PESSOA, S. e KLAUTAU, A.B. - “Orbital Moments of 3d Adatoms and Clusters on the Cu(001) Surfaces”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
18. GARCIA, J.C.; SCOLFARO, L.M.R.; MARQUES, M.; ANJOS, V.; LEITE, J.R., FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A. e SILVA Jr., E.F. da - “Estrutura Eletrônica do SrTiO₃ Cúbico”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
19. GARCIA, M.M.; CALDAS, M.J.; DI FELICE, R. e FERRETTI, A. - “Electronic Transport in Guanine Stacks”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
20. GOYA, G.F.; RECHENBERG, H.R.; SHEN, H.; RAPALVICUITE, R.; SIVAKOV, V.; DONIA, N. e MATHUR, S. - “Ferromagnetismo Fraco em Nanopartículas γFeO_3 obtidas a partir de Precursor Heterobimetálico”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.

21. JESUS, D.R. de e PARTITI, C.S.M. - “Influência do Alumínio nas Propriedades das Ligas $\text{Al}_x\text{Fe}_{78-x}\text{Si}_9\text{B}_{13}$ produzidas por Mecanossíntese”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
22. LEGOAS, S.B.; GALVÃO, D.S. e CALDAS, M.J. - “Estudo Teórico do Processo da Deposição de Ouro sobre Filmes de Poli-para-Fenileno de Vinila (PPV)”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
23. LUDWIG, V. e CANUTO - “Hydrated Electron: A Theoretical Study”. In: *XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica*, Caxambu, Minas Gerais, de 23 a 26 de novembro de 2003.
24. LUDWIG, V.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - “Solvent Effects on Hydrogen Bonds of Biomolecules”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
25. MALARENKO, H. CALDAS, M.J. e JUSTO, J.F.- “Aggregation and Formation Energies of Vacancy Clusters in Si obtained through the EDIP Method. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
26. MALASPINA, T.V. e CANUTO, S.- “Nova Estrutura para Ligação de Hidrogênio entre Pirazina e Água”. In: *XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica*, Caxambu, Minas Gerais, de 23 a 26 de novembro de 2003.
27. MANTILLA OCHOA, J.C.; SOUZA BRITO, G.E. de; TER HAAR, E. e BINDILATTI, V. - “Estudo da Evolução Estrutural em Semicondutores $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{In}_2\text{Se}_4$, por Técnicas de Difração de Raios X”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
28. MARQUES, M.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R. e LEITE, J.R. - “Comportamento da Energia do Gap e Propriedades Estruturais da Liga Quaternária $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{N}$ ”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
29. MARTINS, A.; FANTINI, M.C.A. e SANTOS, A.D. - “Métodos de Preparação de Filmes de FePt com Anisotropia Magnética Perpendicular. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
30. MIRANDA, C.R.; ANTONELLI, A.; FAZZIO, A. e SILVA, A.J.R. da - “Vacancies in Amorphous Silicon: A First Principles Study”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.

31. MORAES, T.F.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - “Estudo Teórico da Solvatação Hidrofílica do Ânion Carboxilato”. In: *XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica*, Caxambu, Minas Gerais, de 23 a 26 de novembro de 2003.
32. NORIEGA, O.C.; SOARES, J.A.N.T.; RODRÍGUEZ, S.C.P.; LEITE, J.R.; TABATA, A.; RIBEIRO, E.; FERNANDEZ, J.R.L.; MENESES, E.A.; CERDEIRA, F; AS, D.J.; SCHIKORA, D. e LISCHKA, K. - “Photoreflectance and Photoluminescence Studies of Optical Transitions in Cubic GaN Grown on GaAs (001) Substrates”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
33. NOVAES, F.D.; SILVA, A.J.R. da ; FAZZIO, A. e SILVA, E.Z. da - “Effect of Impurities in the Large Au-Au Distances in Gold Nanowires”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
34. OLIVEIRA, C. de NOGUEIRA, R.A.; ALVES, J.L.A. e LEITE, J.R. - “Atomic and Electronic Structures of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ Quantum Dots”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
35. ORELLANA, W.; FAZZIO, A. e MIWA, R.H. - “Carbon Nanotube on Si(001): Structural and Electronic Properties”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
36. ORELLANA, W.; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - “Energetic and Structural Properties of N Incorporation in SiO_2 ”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
37. PADUAN Filho, A.; OLIVEIRA Jr., N.F. e BINDILATTI, V. - “Antiferromagnetic in $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{Mn}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Cl}_4$ from Magnetization Steps”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
38. PADUAN Filho, A.; OLIVEIRA Jr., N.F. e BINDILATTI, V. - “Magnetization Steps from a Diluted Heisenberg Antiferromagnetic Chain: Theory and Experiment”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
39. PAIVA R. de; NOGUEIRA, R.A.; LEITE, J.R. e SCOLFARO, L.M.R. - “First Principles of Diluted Magnetic $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ and $\text{Al}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ Alloys”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
40. PINHEIRO, J.R.; FLORES, M.Z.S.; FREIRE, V.N.; SOUZA, H.F. de; MESQUITA, M.V.; FREIRE, P.T.C.; CAVADA, B.S.; ARRUDA, G.B.;

- OLIVEIRA, M.C.F. de; PINHEIRO, J.A.; CARVALHO, M.C.; LEITE, J.R.; DUARTE, C.A.; FERNANDEZ, J.R.L.; SOARES, J.A.N.T.; MORAIS, P.C.; SILVA, S.W. da; CRUZ, J.M.R. e LIMA Filho, L. - “Dopagem da L-Alanina com Metais: Cristalização e Caracterização”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
41. PONTES, R.B., SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - “A Study of Electronic and Structural Properties of the [Co(Tpy-SH)₂]”. In: *XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica*, Caxambu, Minas Gerais, de 23 a 26 de novembro de 2003.
42. RECHENBERG, E.R.; MORELLON, L.; ALGARABEL, P.A. e IBARRA, R.M. - “Momento Magnético do Fe no Sítio 2a da Fase de Laves Antiferromagnética AFe₂”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
43. RIVELINO, R. e CANUTO, S. - “Dissociação de Agregados Moleculares de Lacto-Nitrila com Água”. In: *XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica*, Caxambu, Minas Gerais, de 23 a 26 de novembro de 2003.
44. RIVELINO, R.; RISSI, E.; FILETI, E.E. e CANUTO, S. - “Spectroscopic Properties of Hydrogen Bonded Molecular Clusters”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
45. RODRIGUES, S.C.P.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; SIPAHI, G.M.; CUNHA LIMA, I.C. da e BOSELLI, M.A. - “Propriedades Eletrônicas de Semicondutores Magnéticos Diluídos de Ga_{1-x}Mn_xAs”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
46. ROSSATO, J.; MOTA, R.; BAIERLE, R.J. e FAZZIO, A. - “Effects of Structural Deformations in Carbon Nanotubes”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
47. SCHMIDT, T.M.; ARANTES Jr., J.T. e FAZZIO, A. - “The Electrostatic Potential of the 90° Partial Dislocation and its Interaction with Point Defects in Si”. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
48. SCHOENMAKER, J.; LANCAROTTE, M.S. e SANTOS, A.D. - “Medidas de Contraste Magnetoóptico em Campo Próximo, feitas sobre Amostras Magnéticas Microestruturadas. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
49. SCHÖN, C.G.; PETRILLI, H.M. e ORMEÑO, P.G.G. - “Comportamento Magnético local em Ligas Fe-Mo-Al”. In: *XXVI Encontro Nacional de*

Física da Matéria Condensada, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.

50. SCOLFARO, L.M.R.; TELES, L.K.; LEITE, J.R. e FERREIRA, L.G. - "Indium Segregation and Chemical Ordering in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ Alloys". In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
51. SCOPEL, W.L.; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - "Structural and Electronic Properties of the Amorphous HfO_2 ". In: *XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica*, Caxambu, Minas Gerais, de 23 a 26 de novembro de 2003.
52. SILVA, B.M.; CALDAS, M.J. e GALVÃO, D.S. - "Study of the Evolution of the Electronic Structure of Thiophene and β -Methylthiophene". In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
53. SIPAHI, G.M.; RODRIGUES, S.C.P., SCOLFARO, L.M.R. e LEITE, J.R. - "Hexagonal AlGaIn/GaN Superlattices: Electric Field Effects". In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
54. SOUSA, J.S. de; BARROS, E.B.; FREIRE, V.N.; SILVA Jr., E.F.; LEITE, J.R. e SCOLFARO, L.M.R. - "I-V and C-V Characteristics of High-k Dielectrics based MOS Devices". In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
55. SOUZA, E.C.; LARA, M.C.F.L.; DEPEYROT, J.; SOUZA, M.H.; TOURINHO, F.A.; GOYA, G.F. e RECHENBERG, H.R. - "Enhanced Surface Anisotropy Evidenced by Mössbauer Spectroscopy in Nickel Ferrite Nanoparticles". In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
56. SOUZA, J.A. e JARDIM, R.F. - "Transport and Magnetic Properties of $\text{La}_{0.7-x}\text{Y}_x\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ ". In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
57. TER HAAR, E.; MANTILLA OCHOA, J.C.; COAQUIRA, J.A.H.; SOUZA BRITO, G.E. de; GRATENS, X.; BINDILATTI, V. e SAGREDO, V. - "Spin Glass Behavior in MnIn_2Se_4 ". In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
58. VILELA, S.P.; CALDAS, M.J. e PETRILLI, H.M. - "Interação de Quadropolo Nuclear em Complexos envolvendo Metais. In: *XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, Minas Gerais, de 06 a 10 de maio de 2003.
59. ZANELLA, I.; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - "Electronic and Structural Properties of C_{59}Si on a Hydrogenated Si(100) Surface". In: *XII Simpósio*

Brasileiro de Química Teórica, Caxambu, Minas Gerais, de 23 a 26 de novembro de 2003.

5c - Trabalhos Publicados em Periódicos de divulgação Internacional e com Árbitro:

1. ASSALI, L.V.C.; GAN, F.; KIMERLING, L.C. and JUSTO, J.F. - "Electronic Structure of Light Emitting Centers in Er Doped Si", *Applied Physics A* **76**, 991 (2003).
2. ASSALI, L.V.C.; MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F. - "Transition Metal Impurities in 3C-SiC and 2H-SiC", *Physica B* **340-342**, 116 (2003).
3. AYRES, F.; MACHADO, W.V.M.; JUSTO, J.F. and ASSALI, L.V.C. - "Defects in Mercuric Iodide: an APW Investigation", *Physica B* **340-342**, 918 (2003).
4. BECERRA, C.C. and PADUAN, Filho, A. - "Magnetic Phase diagram of the nearly 2D Heisenberg Ferromagnet $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{CuCl}_4$ in a Transverse Magnetic Field", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **267**, 244 (2003).
5. BECHSTEDT, F.; FURTHMÜLLER, J.; FERHAT, M.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; DAVYDOV, V.; AMBACHER, O. and GOLDHANN, R. - "Energy Gap and Optical Properties of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ", *Physics Status Solidi A* **195**, 628 (2003).
6. BORIN, A.C.; SERRANO-ANDRÉS, L.; LUDWIG, V. and CANUTO, S. - "Theoretical Absorption and Emission Spectra of 1-H and 2-H Benzotriazole", *Physical Chemistry and Chemical Physics* **5**, 5001 (2003).
7. BUSSI, G.; FERRETTI, A.; RUINI, A.; CALDAS, M.J. and MOLINARI, E. - "Optics and Transport in conjugated Polymer Crystals: Interchain Interaction Effects", *Advanced Solid State Physics* **43**, 313 (2003).
8. CAPAZ, R.B. and CALDAS, M.J. - "Ab Initio Calculations of Structural and Dynamical Properties of poly(p-phenylene) and poly(p-phenylene vinylene)", *Physical Review B* **67**, 205205 (2003).
9. CAVALHEIRO, A.; SILVA, E.C.F. da; QUIVY, A.A.; TAKAHASHI, E.; MARTINI, S.; MENESES, E.A. and LEITE, J.R. - "Influence of Illumination on the Quantum Mobility of a Two-Dimensional electron Gas in Si d-doped $\text{GaAs}/\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ Quantum Wells", *Journal of Physics: Condensed Matter* **15**, 121 (2003).

10. COAQUIRA, J. A. H.; OLIVEIRA Jr., N.F.; RAPPL, P.O.; UETA, Y.; ABRAMOF, E. and BAUER, G. - "Electrical Characterization of p-type Pb_{1-x}EuxTe". *Journal of Superconductivity*. **16**, 115 (2003).
11. COAQUIRA, J.A.H.; RECHENBERG, H.R.; MESTNIK Filho, J. and CARBONARI, A.W. - "Structural, Magnetic and Hyperfine Properties of Zr(Cr_{1-x}Fe_x)₂ hydrides", *Journal of Alloys and Compounds* **356**, 200 (2003).
12. COUTINHO, K. and CANUTO, S. - "The Sequential Monte Carlo-Quantum Mechanics Methodology. Application to the Solvent Effects in the Stokes Shift of Acetone in Water", *Journal of Molecular Structure (Theochem)* (Special Issue: Dedicated to QM/MM Methods) **632**, 235 (2003).
13. COUTINHO, K.; GUEDES, R.C.; COSTA CABRAL, B.J. and CANUTO, S. - "Electronic Polarization of Liquid Water: Converged Monte Carlo-Quantum Mechanics Results for the Multipole Moments", *Chemical Physics Letters* **369**, 345 (2003).
14. CRUZ, J.M.R.; SALES, F.V. de; SILVA, S.W. da; SOLER, M.A.G.; MORAIS, P.C.; SILVA, M.J. da; QUIVY, A.A. and LEITE, J.R. - "CW Photoluminescence Determination of the Capture Cross-Section of Self-Assembled InAs Quantum Dots", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **17**, 107 (2003).
15. DALPIAN, G.M.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Theoretical Investigation of a Possible Mn_xSi_{1-x} Ferromagnetic Semiconductor", *Physical Review B* **68**, 113310 (2003).
16. DUARTE, C.A.; SILVA, E.C.F. da; QUIVY, A.A.; MARTINI, S. and LEITE, J.R. - "Influence of the Temperature on the Carrier Capture into Self-Assembled InAs/GaAs Quantum Dots", *Journal of Applied Physics* **93**, 6279 (2003).
17. ERIKSSON, O.; BERGQVIST, L.; HOLMSTROM, E.; BERGMAN, A.; LEBACQ, O.; FROTA-PESSÔA, S.; HJORVARSSON, B. and NORDSTROM, L. - "Magnetism of Fe/V and Fe/Co Multilayers", *Journal of Physics Condensed Matter* **15**, S599 (2003).
18. FAGAN, S.B.; MOTA, R.; BAIERLE, R.J.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Energetics and Structural Properties of Adsorbed Atoms and Molecules on Silicon-Doped Carbon Nanotubes", *Materials Characterization* **50**, 183 (2003).
19. 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* **12**, 861 (2003).

20. 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* **12**, 861 (2003).
21. FAGAN, S.B.; MOTA, R.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Ab Initio Study of an Iron Atom Interacting with Single-Wall Carbon Nanotubes", *Physical Review B* **67**, 205414 (2003).
22. FAGAN, S.B.; MOTA, R.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Electronic and Magnetic Properties of Iron Chains on Carbon Nanotubes", *Microelectronics Journal* **34**, 481 (2003).
23. FAGAN, S.B.; MOTA, R.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Fe and Mn Atoms Interacting with Carbon Nanotubes", *Physica B* **340-342**, 982 (2003).
24. FAGAN, S.B.; SILVA, A.J.R. da; MOTA, R.; BAIERLE, R.J. and FAZZIO, A. - "Functionalization of Carbon Nanotubes Through the Chemical Binding of Atoms and Molecules", *Physical Review B* **67**, 033405 (2003).
25. FAGAN, S.B.; SILVA, A.J.R. da; MOTA, R.; BAIERLE, R.J. and FAZZIO, A. - "Functionalization of Carbon Nanotubes Through the Chemical Binding of Atoms and Molecules", *Physical Review B* **67**, 033405 (2003).
26. FERNANDEZ, J.R.L.; CERDEIRA, F.; MENESES, E.A.; BRASIL, M.J.S.P.; SOARES, J.A.N.T.; SANTOS, A.M.; NORIEGA, O.C.; LEITE, J.R.; AS, D.J.; KÖHLER, U.; POTTHAST, S. and SALAZAR, D.G.P. - "Optical and X-Ray Diffraction Studies on the Incorporation of Carbon as a Dopant in Cubic GaN", *Physical Review B* **68**, 155204 (2003).
27. FERNANDEZ, J.R.L.; NORIEGA, O.C.; SOARES, J.A.N.T.; CERDEIRA, F.; MENESES, E.A.; LEITE, J.R.; AS, D.J.; SCHIKORA, D. and LISCHKA, K. - "Near Band-Edge Optical Properties of Cubic GaN", *Solid State Communications* **125**, 205 (2003).
28. FERRETTI, A.; RUINI, A.; MOLINARI, E. and CALDAS, M.J. - "Electronic Properties of Polymer Crystals: The effect of Interchain Interactions", *Physical Review Letters* **90**, 086401 (2003).
29. FILETI, E.E.; COUTINHO, K.; MALASPINA, T. and CANUTO, S. - "Electronic Changes due to Thermal Disorder of Hydrogen Bonds in Liquids: Pyridine in Aqueous Environment", *Physical Review E* **67**, 61504 (2003).
30. FILETI, E.E.; RIVELINO, R. and CANUTO, S. - "Rayleigh Light Scattering of Hydrogen Bonded Clusters", *Journal of Physics B, Atomic, Molecular and Optical Physics* **36**, 399 (2003).
31. FONSECA, F.C.; GOYA, G.F.; JARDIM, R.F.; CARREÑO, N.; LONGO, E.; LEITE, E. and MUCCILLO, R. - "Magnetic Properties of Ni:SiO₂

- Nanocomposites Synthesized by a Modified Sol-Gel Method”, *Applied Physics A Materials Science Processing* **76**, 621 (2003).
32. GOYA, G.F. and LEITE, E. - “Ferrimagnetism and Spin Canting of ZnFe₂O₄ Nanoparticles”, *Journal of Physics Condensed Matter* **15**, 641 (2003).
 33. GOYA, G.F. and SAGREDO, V. - “Antiferromagnetism and Spin-glass Transition in the FeIn_xCr_{2-x}Se₄ Series of Chalcogenides”, *Solid State Communications* **125**, 247 (2003).
 34. GOYA, G.F.; BERQUÓ, T.S.; FONSECA, F.C. and MORALES, M.P. - “Static and Dynamic Magnetic Properties of Spherical Magnetite Nanoparticles”, *Journal of Applied Physics* **94**, 3520 (2003).
 35. GOYA, G.F.; FONSECA, F.C.; JARDIM, R.F.; MUCCILLO, R.; CARRENO, N.; LONGO, E. and LEITE, E. - “Dynamic Properties of Ni Nanoparticles”, *Journal of Applied Physics* **93**, 6531 (2003).
 36. GUEDES, R.C.; COUTINHO, K.; COSTA CABRAL, B.J. and CANUTO, S. - “Differential Hydration of Phenol and Phenoxy Radical and the Energetics of the Phenol O-H Bond in Solution”, *Journal of Physical Chemistry B* **107**, 4304 (2003).
 37. GUEDES, R.C.; COUTINHO, K.; COSTA CABRAL, B.J.; CANUTO, S.; CORREIA, C.F.; BORGES dos SANTOS, R.M. and MARTINHO SIMÕES, J.A. - “Solvent Effects on the Energetics of the Phenol O-H Bond: Differential Solvation of Phenol and Phenoxy Radical in Benzene and Acetonitrile”, *Journal of Physical Chemistry A* **107**, 9197 (2003).
 38. GUILHERME, E.G.; RECHENBERG, H.R. and COAQUIRA, J.A.H. - “Phase Monitoring during Nd(Fe,M)₁₂ (M = Mo or Ti) Compound Nitrogenation by Chemical Reaction with Sodium Azide”, *Materials Science Forum* **416**, 107 (2003).
 39. GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; LEITE, J.R.; ESTIBALS, O.; and PORTAL, J.C. - “Quantum Hall Ferromagnets in Parabolic Wells”, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* **67**, 155313 (2003).
 40. HANAMOTO, L.K.; FARIAS, C.M.A.; HENRIQUES, A.B.; TRIBUZY, C.V.B.; SOUZA, P.L. and YAVICH, B. - “Influence of the Interface Layers on the Transport Properties of Barrier Structures grown by Low Pressure Metalorganic Vapor Phase Epitaxy”, *Journal of Applied Physics* **94**, 5640 (2003).
 41. JARDIM R.F.; MUNE, P. and GOVEA ALCAIDE, E. - “Influence of the Compaction Pressure on the J_c(Ba) Dependence of Polycrystalline (Bi-

- Pb)₂Sr₂Ca₂Cu₃O_x Compounds”, *Physica C - Superconductivity* **384**, 491 (2003).
42. JARDIM, R.F., ESCOTE, M. T., PONTES, F. M., LEITE, E.R., VARELA, J.A., LONGO, E. - “Microstructural and Transport Properties of LaNiO₃ Films grown on Si (111) by Chemical Solution Deposition”, *Thin Solid Films* **445**, 54 (2003).
43. JARDIM, R.F., ANDRADE, S.; FONSECA, F.C.; BOSSI, I.; TORIKACHVILI, M.S.; LACERDA, A.H. and BENDOR, L. - ”Superconductivity in Magnetic ordered Ru_{1-x}Ir_xSr₂GdCu₂O₈ Compounds”, *Brazilian Journal of Physics* **33**, 686 (2003).
44. JARDIM, R.F.; CARNEIRO, A.S. and FONSECA, F.C.; KIMURA, T. - ”Phase Coexistence in Cr-doped Nd_{0.5}Ca_{0.5}MnO₃ Compounds”, *Journal of Applied Physics* **93**, 8074 (2003).
45. JARDIM, R.F.; FONSECA, F.C.; GOYA, G.F.; CARRENO, N.L.; LONGO, E.; LEITE, E.R. and MUCCILLO, R. - ”Magnetic Properties of Ni:SiO₂ Nanocomposites Synthesized by a Modified Sol-Gel Method”, *Applied Physics A Materials Science* **76**, 621 (2003).
46. JARDIM, R.F.; FONSECA, F.C.; SOUZA, J.A.; MUCCILLO, R.; MUCCILLO, E.N.S.; GOUVEA, D.; JUNG, M.H. and LACERDA, A.H. - ”Transport Properties and Phase Separation in La_{0.6}Y_{0.1}Ca_{0.3}MnO₃ Ceramics”, *Physica Status Solidi A-Applied Research* **199**, 255 (2003).
47. JARDIM, R.F.; GOYA, G.F.; FONSECA, F.C.; MUCCILLO, R.; CARRENO, N.L.V.; LONGO, E. and LEITE, E.R. - “Magnetic Dynamics of Single Domain Ni Nanoparticles”, *Journal of Applied Physics* **93**, 6531 (2003).
48. JARDIM, R.F.; MUNE, P.; FONSECA, F.C. and MUCCILLO, R. - “Magnetic Hysteresis of the Electrical Resistance and the Critical Current Density in Polycrystalline YBa₂Cu₃O_{7-x}-Ag Superconductors”, *Physica C - Superconductivity* **390**, 363 (2003).
49. JIANG, J.Z.; ROSEKER, W.; JACOBSEN, C.S. and GOYA, G.F. - “Low-Temperature Electrical Resistivity of As-Cast Glassy, Relaxed and Crystallized Pd₄₀Cu₃₀Ni₁₀P₂₀Alloy”, *Journal of Physics Condensed Matter* **15**, 8713 (2003).
50. LAMAS, T.E.; MARTINI, S.; SILVA, M.J. da; QUIVY, A.A. and LEITE, J.R. - “Morphological and Optical Properties of p-type GaAs(001) Layers doped with Silicon”, *Microelectronics Journal* **34**, 701 (2003).

51. LARICO, R.; JUSTO, J.F., MACHADO, W.V.M., and ASSALI, L.V.C. - “An Ab Initio Investigation on Nickel Impurities in Diamod”, *Physica B* **340-342**, 84 (2003).
52. LUDWIG, V.; COUTINHO, K.; BORIN, A.C. and CANUTO, S. - “Electronic Polarization of 1H-Benzotriazole in Water. Ground and First Excited State Dipole Moments”, *International Journal of Quantum Chemistry* **95**, 572 (2003).
53. MAKSIMOV, I.; LITTERST, F.J.; RECHENBERG, H.R.; MELO, M.A.C.; FEYERHERM, R.; HENDRIKX, R.W.A.; GORTENMULDER, T.J.; MYDOSH, J.A. and SULLOW, S. - “Effect of Disorder on the Magnetic and Transport Properties of UPd(2-x)Sn”, *Physical Review B* **67**, 10440 (2003).
54. MARQUES, M.; TELES, L.K.; ANJOS, V.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A. and SILVA Jr., E.F. da - “Full-Relativistic Calculations of the SrTiO₃ Carrier Effective Masses and Complex Dielectric Function”, *Applied Physics Letters* **82**, 3074 (2003).
55. MARQUES, M.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; FURTHMÜLLER J. and BECHSTEDT, F. - “Lattice Parameter and Energy Band Gap of cubic Al_xGa_{1-x}In_{1-x-y}N Quaternary Alloys”, *Applied Physics Letters* **83**, 890 (2003).
56. MARTINI, S.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; SILVA, M.J. da; SILVA, E.C.F. da and LEITE, J.R. - “Influence of Indium Segregation on the RHEED Oscillations during the Growth of InGaAs Layers on a GaAs(001) Surface”, *Journal of Crystal Growth* **251**, 101 (2003).
57. MARTINI, S.; QUIVY, AA; SILVA, M.J. da; LAMAS, T.E.; SILVA, E.C.F. da; LEITE, J.R. and ABRAMOF, E. - “Ex-Situ Investigation of Indium Segregation in InGaAs/GaAs Quantum Wells using High-Resolution X-Ray Diffraction”, *Journal of Applied Physics* **94**, 7050 (2003).
58. MARTINS, A.; FANTINI, M.C.A. and SANTOS, A.D. dos - “The Influence of the Deposition Temperature and Substrate on the Properties of FePt Thin Film”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **265**, 13 (2003).
59. MIOTTO, R.; KISS, F.D. and FERRAZ, A.C. - “Oxygen Adsorption on CdTe (110)”, *Surface Science* **525**, 24 (2003).
60. MIOTTO, R.; MIWA, R.H. and FERRAZ, A.C. - “Adsorption of NH₃ on the Ge(001)”, *Physical Review B* **68**, 115436 (2003).
61. MIWA, R.H.; MIOTTO, R. and FERRAZ, A.C.- “In-Rich (4×2) and (2×4) Reconstructions of the InAs(001) Surface”, *Surface Science* **542**, 101 (2003).

62. MIWA, R.H.; MIOTTO, R.; FERRAZ, A.C. and SRIVASTAVA, G.P. - "Ab Initio Study of the GaAs (001) - In (4x2) Surface", *Physical Review B* **67**, 045325 (2003).
63. MIWA, R.H.; VENEZUELA, P. and FAZZIO, A. - "Theoretical Investigation of Extended Defects and Their Interactions with Vacancies in $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ ", *Physical Review B* **67**, 205317 (2003).
64. MONTE, A.F.G.; SALES, F.V. de; SILVA, S.W. da; CRUZ, J.M.R.; SOLER, M.A.G.; MORAIS, P.C.; SILVA, M.J. da; QUIVY, A.A. and LEITE, J.R. - "Photoexcited Carrier Diffusion in Self-Assembled InAs/GaAs Quantum Dots with Different Dot Densities", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **17**, 122 (2003).
65. MORALES, M.A.; SAITOVITCH, E.B. and FROTA-PESSÔA, S. - "Fe Impurities in Cd and Zn Hosts: Theory and Experiment", *Physical Review B* **68**, 94430 (2003).
66. NORIEGA, O.C.; TABATA, A.; SOARES, J.A.N.T.; RODRIGUES, S.C.P.; LEITE, J.R.; RIBEIRO, E.; FERNANDEZ, J.R.L.; MENESES, E.A.; CERDEIRA, F.; AS, D.J.; SCHIKORA, D. and LISCHKA, K. - "Photoreflectance Studies of Optical Transitions in Cubic GaN grown on GaAs (001) Substrates", *Journal of Crystal Growth* **252**, 208 (2003).
67. NOVAES, F.D.; SILVA, A.J.R. da; SILVA, E.Z. da and FAZZIO, A. - "Effect of Impurities in the Large Au-Au Distances in Gold Nanowires", *Physical Review Letters* **90**, 036101 (2003).
68. OLIVEIRA Jr., N.F.; GRATENS, X.; BINDILATTI, V. and GOLACKI, Z. - "Low Temperature Magnetization and exchange Interaction in $\text{Sn}_{1-x}\text{GdxTe}$ ", *Physica B* **329**, 1249-1250 (2003).
69. OLIVEIRA Jr., N.F.; GRATENS, X.; BINDILATTI, V. and GOLACKI, Z. - "Low Temperature Magnetization of $\text{Pb}_{1-x}\text{CexTe}$ ", *Physica B* **329**, 1245 (2003).
70. OLIVEIRA Jr., N.F.; PADUAN Filho, A. and BINDILATTI, V. - "Magnetization Steps in a Diluted Heisenberg Antiferromagnetic Chain: Theory and experiment(CH_3) $4\text{NMnxCd}_{1-x}\text{Cl}_3$ ", *Physical Review B* **68**, 22417 (2003).
71. OLIVEIRA, C. de; NOGUEIRA, R.A.; ALVES, J.L.A. and LEITE, J.R. - "Atomic and Electronic Structures of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ Quantum Dots", *Microelectronics Journal* **34**, 725 (2003).
72. ORELLANA, W.; MIWA, R.H. and FAZZIO, A. - "First-Principles Calculations of Carbon Nanotubes Adsorbed on Si(001)", *Physical Review Letters* **91**, 166802 (2003).

73. ORELLANA, W.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Oxidation at the Si/SiO₂ Interface: Influence of the Spin Degree of Freedom", *Physical Review Letters* **90**, 016103 (2003).
74. PADUAN Filho, A. and BECERRA, C.C. - "Critical Fluctuations in MnP near the Curie Temperature", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **261**, 161 (2003).
75. PADUAN Filho, A. and BECERRA, C.C. - "Field Dependent Susceptibility of the 2D Ferromagnet (CH₃NH₃)₂CuCl₄ in the Paramagnetic Phase", *Solid State Communications* **125**, 99 (2003).
76. PADUAN Filho, A.; FERREIRA, A.C.; BECERRA, C.C.; ALVES, W.A. and ALMEIDA Filho, S.A. - "Comparative Kinetic Studies on Tyrosinase-like Catalytic Activity of Dinuclear Imidazole-Containing Copper Complexes", *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical* **3960**,1 (2003).
77. PEREIRA, L.S.; SANTOS, A.M.; ALVES, J.L.A.; ALVES, H.W.L. and LEITE, J.R. - "Dynamical and Thermodynamic Properties of III-Nitrides", *Microelectronics Journal* **34**, 655 (2003).
78. PEREIRA, T.; FREIRE, J.A.K.; FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R. and SILVA Jr., E.F. da - "Confined Excitons in SrTiO₃/Si/SrTiO₃ Quantum Wells", *Microelectronics Journal* **34**, 507 (2003).
79. PEREIRA, T.A.S.; FREIRE, J.A.K.; FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Carrier Kinetics in Quantum Dots Through Continuous Wave Photoluminescence Modeling: A Systematic Study on a Sample with Surface Dot Density Gradient", *Journal of Applied Physics* **94**, 1787 (2003).
80. QU, F.; LINO, A.T.; DANTAS, N.O.; SILVA, E.C.F. da; QUIVY, A. and LEITE, J.R. - "Optical Properties of H-band Emission in Single Heterojunctions", *Journal of Applied Physics* **94**, 1686 (2003).
81. QU, F.; FANYAO, L.; LINO, A.T.; DANTAS, N.O.; MORAIS, P.C.; SILVA, E.C.F. da; QUIVY, A.A. and LEITE, J.R. - "H-band Emission in Single Heterojunctions", *Microelectronics Journal* **34**, 755 (2003).
82. RAMOS, L.E.; FURTHMÜLLER, J.; LEITE, J.R.; SCOLFARO, L.M.R. and BECHSTEDT, F. - "Group-IV and Group-V Substitutional Impurities in Cubic Group-III Nitrides", *Physical Review B* **68**, 085209 (2003).
83. RISSI, E.; FILETI, E.E. and CANUTO, S. - "Rayleigh and Raman Light Scattering in Hydrogen Bonded Acetonitrile Water", *Theoretical Chemistry Accounts* **110**, 360 (2003).

84. RISSI, E.; RIVELINO, R. and CANUTO, S. - "Application of Density Functional Theory Methods in Millimeter Wave Spectroscopy", *International Journal of Quantum Chemistry* **91**, 575 (2003).
85. RIVELINO, R.; CHAUDHURI, P. and CANUTO, S. - "Quantifying Multiple-Body Interaction Terms in H-bonded HCN Chains with Many-Body Perturbation/Coupled-Cluster Theories", *Journal Chemistry Physics* **118**, 10593 (2003).
86. RUINI, A.; BUSSI, G.; FERRETTI, A.; CALDAS, M.J. and MOLINARI, E. - "Charge Transport and Radiative Recombination in Polythiophene Crystals: A First-Principles Study", *Synthetic Metals* **139**, 755 (2003).
87. SALES, F.V. de; CRUZ, J.M.R.; SILVA, S.W. da; SOLER, M.A.G.; MORAIS, P.C.; SILVA, M.J. da; QUIVY, A.A. and LEITE, J.R. - "Carrier Kinetics in Quantum Dots Through Continuous Wave Photoluminescence Modeling: A Systematic Study on a Sample with Surface Dot Density Gradient", *Journal of Applied Physics* **94**, 1787 (2003).
88. SALES, F.V. de; CRUZ, J.M.R.; SILVA, S.W. da; SOLER, M.A.G.; MORAIS, P.C.; SILVA, M.J. da; QUIVY, A.A. and LEITE, J.R. - "Coupled Rate Equation Modeling of Self-Assembled Quantum Dot Photoluminescence", *Microelectronics Journal* **34**, 705 (2003).
89. SALES, F.V. de; SILVA, S.W. da; CRUZ, J.M.R.; SOLER, M.A.G.; MORAIS, P.C.; SILVA, M.J. da ; QUIVY, A.A. and LEITE, J.R. - "Observation of the Spectral Dependence of the Spatial Photocarrier Redistribution in InAs/GaAs Quantum Dots", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **17**, 120 (2003).
90. SALES, FV de; SILVA, SW da; CRUZ, J.M.R.; SOLER, M.A.G.; MORAIS, P.C.; SILVA, M.J. da; QUIVY, A.A. and LEITE, J.R. - "Observation of the Spectral Dependence of the Spatial Photocarrier Redistribution in InAs/GaAs Quantum Dots", *Physica E* **17**, 120 (2003).
91. SANTOS, A.D.; SCHOENMAKER, J.; LANCAROTTE, M.S.; SEABRA, A.C.; SAMPAIO, L.C. and SOUCHE, Y. - "Local Magnetic Study Through Magneto-Optics and Scanning Near-Field Optical Microscopy", *Acta Microscópica* **12**, 66 (2003).
92. SCHMIDT, T.M.; BAIERLE, R.J.; PIQUINI, P. and FAZZIO, A. - "Theoretical Study of Native Defects in BN Nanotubes", *Physical Review B* **67**, 113407 (2003).
93. SCHIMPL, J.; PETRILLI, H.M. and BLÖCHL, P.E. - "Nitrogen Binding to the FeMo-Cofactor of Nitrogenase", *Journal of the American Chemical Society* **125** (51), 15772 (2003).

94. SCOPEL, W.L.; SILVA, A.J.R. da; ORELLANA, W.; PRADO, R.J.; FANTINI, M.C.A.; FAZZIO, A. and PEREYRA, I. - "Theoretical and Experimental Studies of the Atomic Structure of Oxygen-Rich Amorphous Silicon Oxynitride Films", *Physical Review B* **68**, 155332 (2003).
95. SERGIO, C.S.; GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; LEITE, J.R.; ESTIBAALS, O. and PORTAL, J.C. - "Evolution of the Two-Dimensional towards Three-Dimensional Landau States in wide Parabolic Quantum Well", *Microelectronics Journal* **34**, 763 (2003).
96. SILVA, A.J.R. da; FAZZIO, A.; SANTOS, R.R. dos and OLIVEIRA, L.E. - "Electronic Structure and Origin of Ferromagnetism in $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ Semiconductors", *Physica B* **340-342**, 874 (2003).
97. SILVA, M.J. da; QUIVY, A.A.; MARTINI, S.; LAMAS, T.E.; SILVA, E.C.F. da and LEITE, J.R. - "InAs/GaAs Quantum Dots Optically Active at $1.5 \mu\text{m}$ ", *Applied Physics Letters* **82**, 2646 (2003).
98. SILVA, M.J. da; MARTINI, S.; LAMAS, T.E.; QUIVY, A.A.; SILVA, E.C.F. da and LEITE, J.R. - "Low Growth Rate InAs/GaAs Quantum Dots for Room-Temperature Luminescence over 1.3mm ", *Microelectronics Journal* **34**, 631 (2003).
99. SILVA, M.J. da; QUIVY, A.A.; MARTINI, S.; LAMAS, T.E.; SILVA, E.C.F. da and LEITE, J.R. - "Optical Response at 1.3 and 1.5mm with InAs Quantum Dots Embedded in a Pure GaAs matrix", *Journal of Crystal Growth* **251**, 181 (2003).
100. SOTOMAYOR, N.M.; GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; BYKOV, A.A.; LITVIN, L.V.; MOSHEGOV, N.T.; TOROPOV, A.I.; ESTIBALS, O. and PORTAL, J.C. - "Commensurability Oscillations in Antidot Lattice in Quasi-Three Dimensional Electron Gas", *Physics Review B* **67**, 113308 (2003).
101. TABATA, A.; OLIVEIRA, J.B.B.; LAMAS, T.E.; SERGIO, C.S.; QUIVY, A.A.; GUSEV, G.M. and LEITE, J.R. - "Optical Properties of Remotely Doped Parabolic Quantum Wells", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **17**, 262 (2003).
102. TELES, L.K.; FERREIRA, L.G.; LEITE, J.R.; SCOLFARO, L.M.R.; KHARCHENKO, A.; HUSBERG, O.; AS, D.J.; SCHIKORA, D. and LISCHKA, K. - "Strain-Induced Ordering in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alloys", *Applied Physics Letters* **82**, 4274 (2003).
103. TER HAAR, E.; BETANCOURT, L.; SAGREDO, V. and DELGADO, D. - "Magnetic Behavior and Structural Characterization of the Semiconducting Compound $\text{CdGa}_{0.3}\text{Cr}_{1.7}\text{S}_4$ ", *Revista Mexicana de Física* **49**, 201 (2003).

104. VARGAS, J.M.; SOCOLOVSKY, L. M.; GOYA, G.F.; KNOBEL, M. and ZANCHET, D. - "Structural, Magnetic and Mössbauer Characterization of Controlled-Size Iron Oxide Nanoparticles obtained by Chemical Methods", *IEEE Transactions on Magnetics* **39**, 2681 (2003).

5d - Trabalhos Aceitos para Publicação:

1. ALMEIDA, R.B.; BORGES, A.N.; MACHADO, P.C.M.; LEITE, J.R. and OSÓRIO, F.A.P. - "Polaronic Effects on the Intra-Donor $1s \rightarrow 2p_{\pm}$ Transition Energies in GaN Structures", *Solid State Communications* (2003).
2. ALVES, H.W.L.; ALVES, J.L.A.; SANTOS, A.M.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Ab Initio Calculation of the (100) and (110) Surface Phonon Dispersion of GaAs and GaN", *Brazilian Journal of Physics* (2003).
3. ALVES, H.W.L.; ALVES, J.L.A.; SANTOS, A.M.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Strain-Induced Shifts of the Zone-Center Phonons of III-nitrides", *Brazilian Journal of Physics* (2003).
4. ALVES, W.A.; SANTOS, R.H.D.A.; PADUAN Filho, A.; BECERRA, C.C.; BORIN, A.C. and FERREIRA, A.M.C. - "Molecular Structure and Intra and Intermolecular Magnetic Interactions in a Chloro-bridged Copper(II) Dimer", *Inorganica Chimica Acta* **357**, 2269-2278 (2004).
5. ASSALI, L.V.C.; MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F. - "Structural and Electronic Properties of 3d Transition Metal Impurities in Silicon Carbide", *Physical Review B* (2003).
6. ASSALI, L.V.C.; MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F. - "Titanium Impurities in Silicon, Diamond and Silicon Carbide", *Brazilian Journal of Physics* (2003).
7. AYRES, F.; ASSALI, L.V.C.; MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F. - "A First Principles Investigation of Mercuric Iodide: Bulk Properties and Intrinsic Defects", *Brazilian Journal of Physics* (2003).
8. BARBOSA, K.O.; ASSALI, L.V.C.; MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F. - "Structural and Electronic Properties of Ti Impurities in SiC: An Ab Initio Investigation", *Computational Materials Science* (2003).
9. BERQUÓ, T.S.; THOMPSON, R. and PARTITI, C.S.M. - "Magnetic Study of Brazilian Peats from São Paulo State", *Geoderma* **118**, 223-243 (2004).
10. CASTRO, G.M.B.; RODRIGUES, A.R.; MACHADO, F.L.A and JARDIM, R.F. - "Evidence of Dynamical Phase Separation in $\text{La}_{0.6}\text{Y}_{0.1}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$

- Manganite”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (2003).
11. CASTRO, G.M.B.; RODRIGUES, A.R.; MACHADO, F.L.A and JARDIM, R.F. - “Magneto-impedance Measurements in Bulk Samples of $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ and $\text{La}_{0.6}\text{Y}_{0.1}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ ”, *Journal of Alloys and Compounds* (2003).
 12. DEACON, R.S.; NICHOLAS, R.J.; HENRIQUES, A.B. and MASON, N.J. - “Magnetoresistance Studies of Strongly Coupled Superlattices”, *Physica E* (2003).
 13. ESTIBALS, O.; KVN, Z.D.; GUSEV, G.M.; ARNAUD, G. and PORTAL, J.C. - “Magnetoconductivity of a Spin-Polarized Two-Dimensional Electron Gas near the (111) Silicon Surface”, *Physica E - Low-Dimensional Systems & Nanostructures* (2003).
 14. FERLAUTO, A.S.; ALVAREZ, F.; FONSECA, F.C.; GOYA, G.F. and JARDIM, R.F. - “Superconductivity and Magnetism in $\text{Ru}_{1-x}\text{Ir}_x\text{Sr}_2\text{GdCu}_2\text{O}_8$ Compounds”, *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials* (2003).
 15. FONSECA, F.C.; CARNEIRO, A.S.; JARDIM, R.F.; O’BRIEN, J.R. and KIMURA, T. - “Magnetization Steps in the Phase-Separated Cr-Doped $\text{Nd}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$ ”, *Journal of Applied Physics* (2003).
 16. GOVEA-ALCAIDE, E.; MUÑE, P. and JARDIM, R.F. - “Effects of Uniaxial and Isostatic Compacting Pressures on the $J_c(\text{Ba})$ Behavior in $\text{Bi}_{1.65}\text{Pb}_{0.35}\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ Compounds”, *Physica C* (2003).
 17. GOVEA-ALCAIDE, E.; MUÑE, P. and JARDIM, R.F. - “Inhomogeneous Distribution of Uniaxial Compacting Pressure and its Effects on Transport Properties of $\text{Bi}_{1.65}\text{Pb}_{0.35}\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ Superconductors”, *Physica C* (2003).
 18. GUSEV, G.M.; C.S. SERGIO, QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; LEITE, J.R.; ESTIBALS, O. S and PORTAL, J.C. - “Charge Density Wave Instability in a Multicomponent Quantum Hall System”, *Physica E* (2003).
 19. GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; LEITE, J.R.; ESTIBALS, O. and PORTAL, J.C. - “Transport Properties of the Quantum Hall Ferromagnet in a Parabolic Wells”, *Physica E* (2003).
 20. GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A.; T LAMAS, T.E.; LEITE, J.R.; ESTIBALS, O. S and PORTAL, J.C. - “Transport of the Quasi-Three-Dimensional Hole Gas in a Magnetic Field in the Ultra-Quantum Limit”, *Physica E* (2003).
 21. HANAMOTO, L.K.; HENRIQUES, A.B.; OLIVEIRA RAPPL, P.H. de; OLIVEIRA Jr., N.F.; UETA, A.Y. and ABRAMOF, E. - “Magnetic Field Induced Absorption in $\text{Pb}_x\text{Eu}_{1-x}\text{Te}$ Magnetic Semiconductors”, *Brazilian Journal of Physics* (2003).

22. HENRIQUES, A.B.; DEACON, R. and NICHOLAS, R.J. - "Monte Carlo Study of Miniband Conduction in Extreme Type-II Superlattices", *Brazilian Journal of Physics* (2003).
23. KVON, Z.D.; RENARD, V.; GUSEV, G.M. and PORTAL, J.C. - "Large Positive Quasi-Classical Magnetoresistance in High Mobility 2D Electron Gas: Interplay of Short-and Long-Range Disorder", *Physica E - Low-Dimensional Systems & Nanostructures* (2003).
24. LARICO, R.; ASSALI, L.V.C., MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F. - "Isolated Nickel Impurities in Diamond: A Microscopic Model for the Electrically Active Centers", *Applied Physics Letters* (2003).
25. LARICO, R.; ASSALI, L.V.C.; MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F. - "Nickel Impurities in Diamond: a FP-LAPW Investigation", *Computational Materials Science* (2003).
26. LARICO, R., JUSTO, J.F., MACHADO, W.V.M. and ASSALI, L.V.C. - "Electronic Properties of Isolated Nickel in Diamond", *Brazilian Journal of Physics* (2003).
27. NUNES, R.W.; ASSALI, L.V.C. and JUSTO, J.F. - "Ab Initio Investigations on the Dislocation Core Properties in Zinc-Blende Semiconductors", *Computational Materials Science* (2003).
28. OLIVEIRA, R.F.; HENRIQUES, A.B.; LAMAS, T.E.; QUIVY, A.A.; PIRES, M.P. YAVICH, B. and SOUZA, P.L. - "Luminescence from Miniband States in Heavily doped Superlattices", *Brazilian Journal of Physics* (2003).
29. SANDIM, M.J.R. and JARDIM, R.F. - "Inhomogeneous Distribution of Uniaxial Compacting Pressure and its Effects on Transport Properties of $\text{Sm}_{1.83}\text{Ce}_{0.17}\text{CuO}_{4-x}$ Superconductor", *Physica C* (2003).
30. SOTOMAYOR CHOQUE, N.M.; GUSEV, G.M. and LEITE, J.R. - "Evolution from Commensurability to Size-Effects Structures in Three Dimensional Billiards", *Brazilian Journal of Physics* (2003).
31. TELES, L.K.; MARQUES, M.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R. and FERREIRA, L.G. - "Phase Separation and Ordering in Group-III Nitride Alloys", *Brazilian Journal of Physics* (2003).
32. TORIKACHVILI, M.S.; BOSSI, I.; O'BRIEN, J.R.; FONSECA, F.C.; MUCCILLO, R. and JARDIM, R.F. - "Superconductivity and Magnetism in $\text{Ru}_{1-x}\text{Ir}_x \text{Sr}_2\text{GdCu}_2\text{O}_8$ Compounds", *Physica C* (2003).

5e – Publicação de Livro:

1. WATARI, K. - “Mecânica Clássica”, Vol. 2, 1ª edição, Editora Livraria da Física, São Paulo, SP (2003).