

Departamento de Física dos  
Materiais e Mecânica

D F M T

Relatório de Atividades

2004



Instituto de Física  
Universidade de São Paulo

## **Editor**

**Prof. Dr. Sylvio Roberto Accioly Canuto**  
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 (dezembro 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 2004.....
- 2b. Disciplinas de Graduação Ministradas no 2º Semestre de 2004.....
- 2c. Disciplinas de Pós-Graduação Ministradas no 1º Semestre de 2004 .....
- 2d. Disciplinas de Pós-Graduação Ministradas no 2º Semestre de 2004 .....
- 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

### 4 - ATIVIDADES DE PESQUISA

- 4a. Grupos de Pesquisa .....
- 4b. Trabalhos em Andamento ou Concluídos em 2004.....
- 4c. Projetos de Pesquisa com Financiamento Externo .....
- 4d. Estágios e Visitas Científicas .....
- 4e. Participação em Reuniões Científicas Internacionais.....
- 4f. Participação em Reuniões Científicas Nacionais .....
- 4g. Prêmios e Outras Distinções .....

### 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 Capítulos de Livros .....
- 5f. Publicação de Capítulo de Revista .....
- 5g. Publicação de Livros .....

# 1 - COMPOSIÇÃO DO DEPARTAMENTO

## 1a - Chefia:

<b>Chefe</b>	<b>Suplente</b>
HERCÍLIO RODOLFO RECHENBERG (23.02.2002 a 22.02.2004)	NEI FERNANDES DE OLIVEIRA JR. (23.02.2002 a 22.02.2004)
SYLVIO ROBERTO ACCIOLY CANUTO (23.02.2004 a 22.02.2006)	MARÍLIA JUNQUEIRA CALDAS (23.02.2004 a 22.02.2006)

## 1b - Conselho Departamental:

<b>PROFESSORES TITULARES (MS-6)</b>
Adalberto Fazzio Armando Corbani Ferraz Carlos Castilla Becerra José Roberto Leite (1) Hercílio Rodolfo Rechenberg Maria Cristina dos Santos (3) Marília Junqueira Caldas Nei Fernandes de Oliveira Jr. Renato de Figueiredo Jardim (2) Sylvio Roberto Accioly Canuto

<b>PROFESSORES ASSOCIADOS (MS-5)</b> <b>(08.10.2003 a 07.10.2005)</b>	
<b>Titulares</b>	<b>Suplentes</b>
André Bohomoletz Henriques Renato de Figueiredo Jardim (2)	Armando Paduan Filho Valdir Bindilatti
Lucy Vitória Credídio Assali Antônio Domingues dos Santos	Helena Maria Petrilli Guennadii Michailovich Gusev

<b>PROFESSORES DOUTORES (MS-3)</b> <b>(12.03.2003 a 11.03.2005)</b>	
<b>Titulares</b>	<b>Suplentes</b>
Kazunori Watari Ewout Ter Haar Gerardo Fabián Goya	Carmen Silvia de Moya Partiti Euzi Conceição Fernandes da Silva (4)

<b>REPRESENTANTES DISCENTES - PÓS-GRADUAÇÃO (05.11.2003 a 04.11.2004)</b>	
<b>Titular</b>	<b>Suplente</b>
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
Maria Cristina dos Santos (3)	RDIDP
Marília Junqueira Caldas	RDIDP
José Roberto Leite (1)	RDIDP
Nei Fernandes de Oliveira Júnior	RDIDP
Renato de Figueiredo Jardim (2)	RDIDP
Sylvio Roberto Accioly Canuto	RDIDP

#### **PROFESSORES ASSOCIADOS (MS-5)**

André Bohomoletz Henriques	RDIDP
Antônio Domingues dos Santos	RDIDP
Antônio José Roque da Silva	RDIDP
Armando Paduan Filho	RDIDP
Euzi Conceição Fernandes da Silva (4)	RDIDP
Guennadii Michailovich Gusev	RDIDP
Helena Maria Petrilli	RDIDP
Lucy Vitória Credidio Assali	RDIDP
Valdir Bindilatti	RDIDP

#### **PROFESSORES DOUTORES (MS - 3)**

Carmen Silvia de Moya Partiti	RDIDP
Daniel Reinaldo Cornejo (5)	RDIDP
Ewout Ter Haar	RDIDP
Gerardo Fabián Goya	RDIDP
Kazunori Watari	RDIDP
Luísa Maria Ribeiro Scolfaro	RDIDP

(1) 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 perdurasse a sua investidura no cargo. Despacho do Reitor de 29.05.2003. Publicação no Diário Oficial de 05.06.2003. **Faleceu em 11 de junho de 2004.**

(2) Aprovado no concurso para o provimento de dois Cargos de Professor Titular, Ref. MS-6, junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica. A nomeação foi publicada no Diário Oficial de 18.09.2004.

(3) Aprovada no concurso para o provimento de dois Cargos de Professor Titular, Ref. MS-6, junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica. A nomeação foi publicada no Diário Oficial de 17.11.2004. A contratação ocorreu em 1º.12.2004.

(4) Aprovada no concurso Livre-Docência, Ref. MS-5, junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica. A nomeação foi publicada no Diário Oficial de 30.04.2004. Portaria do Reitor de 20.04.2004.

(5) Aprovado no concurso para o provimento de um Cargo de Professor Doutor, Ref. MS-3, junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica. A nomeação foi publicada no Diário Oficial de 04.11.2004. A contratação ocorreu em 1º.12.2004.

## **1d - Pessoal Técnico e Administrativo:**

### **TÉCNICO:**

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 (1)  
Luiz Carlos dos Santos  
Marcelo Shiroma Lancarotte  
Márcia Ribeiro  
Marco Antônio Meira  
Olímpio Ribeiro da Fonseca Neto  
Paulo Sérgio Martins da Silva  
Renato Cohen  
Rui Fernandes de Oliveira  
Sérgio Antônio Romero  
Vagner Aparecido Braghin  
Walter Soares de Lima

(1) Aposentado a partir de 1º.10.2004.

**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 2004:**

Adalberto Fazzio	Introdução à Física Atômica e Molecular	FNC 0315
André Bohomoletz Henriques	Física IV	FAP 0212
Antônio Domingues dos Santos	Física Experimental VI	FNC 0314
Antônio José Roque da Silva	PÓS-GRADUAÇÃO	
Armando Corbani Ferraz	Elettricidade I	FGE 0270
Armando Paduan Filho	BÔNUS NOTURNO	
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	Mecânica	FAP 0153
Ewout Ter Haar	Laboratório de Física para Ciências	FGE 1189
	Farmacêuticas	
Gerardo Fabian Goya	Introdução às Medidas em Física	FAP 0181
Guennadii Michailovich Gusev	Mecânica	FAP 0153
Helena Maria Petrilli	Física para Ciências Biológicas	FGE 1187
José Roberto Leite (1)	vide página 3 do relatório	

Hercílio Rodolfo Rechenberg	Física Moderna II	FNC 0376
Kazunori Watari	Física Matemática II	FMA 0307
Luísa Maria Ribeiro Scolfaro	Física III	FGE 0211
Marília Junqueira Caldas	Física para Ciências Biológicas	FGE 1187
Nei Fernandes de Oliveira Jr.	Termodinâmica	FMT 0308
Renato de Figueiredo Jardim	COBRANDO CARGA DUPLA	
Sylvio Roberto Accioly Canuto	Física V	FNC 0311
Valdir Bindilatti	Física Moderna II	FNC 0376
Valmir Antônio Chitta	Eletricidade I	FGE 0270

## **2b - Disciplinas de Graduação Ministradas no Segundo Semestre de 2004:**

Adalberto Fazzio	Física dos Materiais	FMT 0502
André Bohomoletz Henriques	Introdução à Física Atômica e Molecular	FNC 0315
Antônio Domingues dos Santos	Física Experimental V	FNC 0313
Antônio José Roque da Silva	Grupos e Tensores	FMT 0429
Armando Corbani Ferraz	Eletricidade II	FGE 0271
Armando Paduan Filho	Física Experimental (IQ)	FGE 2255
Carlos Castilla Becerra	Física para Engenharia IV	FAP 2204
Carmen Sílvia de Moya Partiti	Introdução à Espectroscopia	FAP 0425
Euzi Conceição Fernandes da Silva	Eletricidade I (IQ)	FAP 0270
Ewout Ter Haar	COBRANDO CARGA DUPLA	
Gerardo Fabian Goya	Física I (IQ)	FEP 2145
Guennadii Michailovich Gusev	Eletricidade I (IME)	FGE 0270
Helena Maria Petrilli	Física para Engenharia II	FEP 2196
Hercílio Rodolfo Rechenberg	Física Moderna I	FNC 0375
José Roberto Leite	vide página 3 do relatório	
Kazunori Watari	Mecânica I	FMT 0305
	Física Matemática II	FMA 0307
Lucy Vitória Credidio Assali	Introdução à Física do Estado Sólido	FMT 0402
Luísa Maria Ribeiro Scolfaro	Física IV	FAP 0212
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	Mecânica Quântica I	FMA 0404
Valdir Bindilatti	Física Moderna I	FNC 0375

**2c - Disciplinas de Pós-Graduação Ministradas no Primeiro Semestre de 2004:**

Antônio José Roque da Silva	Teoria de Grupos	FMT 853
Lucy Vitória Credidio Assali	Física de Semicondutores	FMT 5818

**2d - Disciplinas de Pós-Graduação Ministradas no Segundo Semestre de 2004:**

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

**2e - Seminários:**

**III-Nitride Optoelectronic Materials and Devices at the Center for Quantum Devices of the Northwestern University**

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Profa. Dra. Manijeh Razegui, Director of the Center for Quantum Devices, Department of Electrical and Computer Engineering, Northwestern University - Evanston, Illinois, USA

Data: 30 de março de 2004

**Improving the Outlook on Iron Disorders - Liver Iron Measurement and Mapping Using Magnetic Resonance Imaging**

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Dr. Wanida Chua-anusorn, Inner Vision Biometric Pty Ltd, School of Physics, Faculty of Life and Physical Sciences, The University of Western Australia, Australia

Data: 09 de junho de 2004

**Cálculo Óptico e Magnetoóptico em Multicamadas Magnéticas**

Seminário do Laboratório de Materiais Magnéticos

Prof. Dr. Antonio Domingues dos Santos, IFUSP

Data: 18 de junho de 2004

**Modelagem de Transições Metamagnéticas em Antiferromagnetos**

Seminário do Laboratório de Materiais Magnéticos

Thiago Barros Martins, Estudante de Mestrado, IFUSP

Data: 02 de julho de 2004

**Nanocristalinos TR-MT com Dopantes: Busca de Melhores Propriedades Magnéticas. (TR = terras raras, MT = metal de transição)**

Seminário do Laboratório de Materiais Magnéticos

Regina Keiko Murakami, Estudante de Doutorado, IFUSP

Data: 13 de agosto de 2004

Propriedades de Transporte em Filmes de Magnetita crescidos por CVD (Chemical Vapor Deposition)

Seminário do Laboratório de Materiais Magnéticos

Waldir Leles, Estudante de Mestrado, IFUSP

Data: 20 de agosto de 2004

**Distribuição de Anestésicos Voláteis em Bio-Membrana**

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Dra. Monica Andrea Pickholz, Pós-Doutoranda, Instituto de Física da UNICAMP

Data: 22 de setembro de 2004

**Energy Levels and Structural Properties of Atomic Systems Under External Confinements**

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Dr. Prasanta Kumar Mukherjee, Indian Association for the Advancement of Science, Calcuta, Índia

Data: 29 de setembro de 2004

**Magnetoótica e Ressonância Plasmon em Filmes Finos**

Seminário do Laboratório de Materiais Magnéticos

Dr. Luís Guilherme Costa Melo, Pós-Doutorando, IFUSP

Data: 22 de outubro de 2004

**Nature of the Ferromagnetic to Paramagnetic Phase Transition in La<sub>0.7</sub>Ca<sub>0.3</sub>MnO<sub>3</sub>: First or Second order ?**

Seminário do Laboratório de Materiais Magnéticos

José Antônio de Souza, Estudante de Doutorado, IFUSP

Data: 12 de novembro de 2004

**Crescimento e Caracterização de GaN Dopado com Carbono e de Ligas de InGaN não Dopadas na Fase Cúbica**

Seminário do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores

David Gregorio Pacheco Salazar, Estudante de Doutorado, IFUSP

Data: 23 de novembro de 2004

**Small Transition Metal Clusters in a Ag Host Lattice: Hyperfine Interaction Experiments understood by Theory**

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Dr. Stefaan Cottenier, Department of Physics and Astronomy, Katholieke Universiteit Leuven, Belgium

Data: 08 de dezembro de 2004

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

### **Adalberto Fazzio**

#### **III Encontro da Sociedade Brasileira de Materiais - SBPMat**

##### **Symposium A - Nanostructured Materials: Synthesis, Characterization and Theory**

Scientific Committee

Adalberto Fazzio (IFUSP)

Carlos A. Achete (COPPE/UFRJ)

Emmanuelle Orhan (IQ-UNESP)

Israel Baumvol (DF/UFRGS)

Helio C. N. Tolentino (LNLS)

Mônica A. Cocha (IF-UNICAMP)

Ótom Anselmo de Oliveira (DEMA/UFSCar)

Walter José Botta (DEMA/UFSCar)

Wander L. Vasconcelos (DEM/UFMG)

Zelma Rocha da Silva (DEM/UFMG)

Foz de Iguaçu, Paraná

Período: de 10 a 13 de outubro de 2004.

#### **XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada**

Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP) Coordenador Geral

Celso Pinto de Melo (UFPE) Coordenador de Programa

Adalberto Fazzio (IFUSP) Presidente da SBF

Poços de Caldas, Minas Gerais

Período: 04 a 08 de maio de 2004.

### **Antônio José Roque da Silva**

#### **Curso de Verão IFUSP'2004**

Coordenador Geral

Universidade de São Paulo, Instituto de Física

São Paulo, SP

Período: de 16 a 20 de fevereiro de 2004.

## **XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada**

Coordenador de Tema  
Supercondutores  
Poços de Caldas, Minas Gerais  
Período: 04 a 08 de maio de 2004.

## **IX Olimpíada Ibero Americana de Física 2004**

Membro da Comissão Organizadora Nacional  
Período: de 25 de setembro a 02 de outubro de 2004.

### **Carmen Silvia de Moya Partiti** **Primeira Semana de Licenciatura do IME-USP** Comissão Coordenadora

Antônio Carlos Brolezzi (IME-USP)  
Carmen Silvia de Moya Partiti (IFUSP)  
Cristina Cerri (IME-USP)  
Rosa Maria dos Santos Barreiro Chaves (IME-USP)  
Sérgio Alves (IME-USP)  
Vinício M. Santos (FE-USP)

Universidade de São Paulo, Instituto de Matemática e Estatística  
São Paulo, SP  
Período: de 04 a 08 de outubro de 2004.

### **Gerardo Fabián Goya** **III Encontro da Sociedade Brasileira de Materiais - SBPMat** **Symposium A - Nanostructured Materials: Synthesis, Characterization and Theory**

Symposium Organizers  
Edson Roberto Leite (UFSCar)  
Gerardo Fabián Goya (IFUSP)  
Jose Antonio Brum (LNLS)  
Oswaldo L. Alves (IQ-UNICAMP)  
Oscar Loureiro Malta (DQ-UFPE)

Foz de Iguaçu, Paraná  
Período: de 10 a 13 de outubro de 2004.

### **Helena Maria Petrilli**

## **XIII International Conference on Hyperfine Interactions and XVII International Symposium on Nuclear Quadrupole Interactions**

### International Advisory Committee

Achtziger (Germany)	H. Akai (Japan)
E. Alp (USA)	E. Baggio-Saitovitch (Brazil)
Z. Berant (Israel)	J. Billowes (UK)
P. Blaha (Austria)	P. Boolchand (USA)
D. Brinkmann (Switzerland)	J. Budnick (USA)
T. Butz (Germany)	S. Campbell (Australia)
G. Catchen (USA)	D. Chaplin (Australia)
L. Chow (USA)	G.S. Collins (USA)
R. Coussement (Belgium)	S. Cox (UK)
P. Dalmas de Réotier (France)	T.P. Das (USA)
S.K. Date (India)	P. Dederichs (Germany)
J. Gardner (USA)	H. Haas (Germany)
H. Jaeger (Germany)	R. Kiefl (Canada)
K.-P. Lieb (Germany)	M. Mekata (Japan)
T. Minamisono (Japan)	A. Pasquevich (Argentina)
H. M. Petrilli (Brazil)	J. Ramakrishna (India)
G.N. Rao (USA)	P. Riedi (UK)
R. Rüffer (France)	G. Savard (USA)
J.C. Soares (Portugal)	K.H. Speidel (Germany)
N. Stone (UK)	R. Wäppling (Sweden)
T. Wichert (Germany)	P. Wodniecki (Poland)
M.O. Zacate (USA)	S. Zhu (China)

Bonn, Alemanha

Período: de 23 a 27 de agosto de 2004.

### **Hercílio Rodolfo Rechenberg**

#### **XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada**

Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP) Coordenador Geral

Celso Pinto de Melo (UFPE) Coordenador de Programa

Adalberto Fazzio (IFUSP) Presidente da SBF

Comitê Local

Cleber Renato Mendonça (IFSC/USP, São Carlos)

Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP)

Marcus Aloizio Martinez de Aguiar (IF-UNICAMP)

Poços de Caldas, Minas Gerais

Período: 04 a 08 de maio de 2004.

#### **10<sup>th</sup> International Conference on Magnetic Fluids**

Scientific Organizing Committee

Antonio M. Figueiredo Neto (Brazil) (Chairman)

Andrejs Cebers (Latvia)

Jérôme Depeyrot (Brazil)  
Ubbo Felderhof (Germany)  
Rosângela Itri (Brazil)  
David P. Jackson (USA)  
Pedro Licínio (Brazil)  
Toru Maekawa (Japan)  
José A. Miranda (Brazil)  
Régine Perzynski (France)  
Daniel Pusiol (Argentina)  
Yuri L. Raikher (Russia)  
Hercílio Rechenberg (Brazil)  
Cláudio Scherer (Brazil)  
Suhaila M. Shibli (Brazil)  
Maria Aparecida G. Soler (Brazil)  
Francisco A. Tourinho (Brazil)

Guarujá, São Paulo  
Período: 02 a 06 de agosto de 2004.

**Marília Junqueira Caldas**

**3ª Reunião de Trabalho do Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos -  
Institutos do Milênio (CNPq),**  
Co-Organizadora

Atibaia, São Paulo  
Período: 04 a 07 de abril de 2004.

**Gordon Research Conference on Defects in Semiconductors**

“Defects in Organic Materials” - Discussion Leader

New London, NH, EUA  
Período: 18 a 23 de julho de 2004.

**27<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors – ICPS’27**

IUPAP C8 Commission  
M.S. Skolnick (United Kingdom) Chair  
F. Capasso (United States) Vice-Chair  
L. Viña (Spain) Secretary  
M.J. Caldas (Brazil)  
E. Gornik (Áustria)  
M. Grunberg (Poland)  
P. Hawrylak (Canada)  
K. von Klitzing (Germany)  
J.-Y. Marzin (France)  
B. Pivac (Croatia)

H. Sakaki (Japan)  
M. Simmons (Australia)  
V.B. Timofeev (Russia)

Flagstaff, Arizona, Estados Unidos  
Período: 26 a 30 de julho de 2004.

### **III Encontro da Sociedade Brasileira de Materiais - SBPMat Symposium C - Supramolecular Materials and Devices**

Scientific Committee  
Giovanni Marletta (UNICT, Italy)  
Ivo A. Hummelgen (UFPR)  
Leni Akcelrud (UFPR)  
Luiz H.C. Mattoso (CNPDIA, EMBRAPA)  
Marília Junqueira Caldas (IFUSP)  
Marysilvia Ferreira (COPPE, UFRJ)  
Osvaldo N. Oliveira Jr. (IFSC/USP, São Carlos)  
Rodrigo Martins (UNL, Portugal)  
Teresa D. Z. Atvars (IF-UNICAMP)

Foz de Iguaçu, Paraná  
Período: de 10 a 13 de outubro de 2004.

### **Simpósio 2º Convenção USP: O futuro da Educação, Ciência e Tecnologia no Brasil**

Comissão Executiva  
Edson Emanuel Simões (TC/São Paulo) (Presidente)  
Afrânio Mesquita (IO-USP)  
Bronislaw Polakiewicz (FCF-USP)  
Henrique Lindenberg Neto (EPUSP)  
Jeannette A. Maman (FD-USP)  
Marília Junqueira Caldas (IFUSP)  
Witold Zmitrowicz (EPUSP)

Sala do Conselho Universitário, USP  
São Paulo, SP  
Data: 11 de novembro de 2004.

### **Renato de Figueiredo Jardim Workshop em Cerâmicas Nanoestruturadas e Interfaces**

Coordenador  
Edson Roberto Leite (LIEC-DQ-UFSCar)  
Comitê Organizador

Elson Longo (LIEC-DQ-UFSCar )  
José Arana Varela (LIEC-IQ-UNESP, Araraquara)  
Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP)  
Reginaldo Muccillo (IPEN)

São Carlos, SP  
Período: de 14 a 16 de junho de 2004.

### **III Encontro da Sociedade Brasileira de Materiais - SBPMat**

National Committee  
Aloísio Klein (UFSC)  
Angelo Fernando Padilha (Escola Politécnica, USP)  
Antônio Gouveia de Souza (LABPESQ, UFPB)  
Dulce M. A. Melo (UFRN)  
Edgar Dutra Zanotto (Dema, UFSCar)  
Elisa Baggio Saitovitch (CBPF)  
Evandro Mirra de Paula e Silva (MCT)  
Fernando Lázaro Freire Jr. (DF PUC-RJ)  
Israel Baumvol (IF- UFRGS)  
José Antonio Eiras (DF-UFSCar)  
Luiz de Souza Santos Júnior (DQ-UFPI)  
Moni Behar (IF- UFRGS)  
Nilson Dias Vieira (IPEN)  
Oswaldo Luis Alves (IF-UNICAMP)  
Paulo R. Rios (Depto de Eng. Industrial e Metalúrgica, UFF)  
Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP)  
Roberto Villas Bôas (CETEM)  
Sérgio M. Rezende (DF- UFPE)  
Sidnei Antônio Pianaro (DEMA-UEPG)  
Umbelino Gomes (UFRN)  
Wido H. Schreiner (DF-UFRN)

### **Symposium E - Progress on Development of Electroceramic Materials (Joint Symposium: IV Brazilian Symposium on Electroceramics)**

Scientific Committee  
D. Garcia (UFSCar)  
D. Gouvêa (USP)  
D. M. P. Souza (UFSCar)  
E. N. S. Muccillo (IPEN)  
Edson Roberto Leite (UFSCar)  
Fábio Cora Fonseca (IPEN)  
M. A. Zaghete (UNESP)  
M. Cilense (UNESP)  
Renato de Figueiredo Jardim(USP)  
Joana Darc Gomes Fernandes (University of Genoa, Italy)



Marcus Antônio de Freitas Melo (University of Genoa, Italy)  
Paolo Nanni (University of Genoa, Italy)

Foz de Iguaçu, Paraná  
Período: de 10 a 13 de outubro de 2004.

**Sylvio Roberto Accioly Canuto**  
**IX Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica**

Comitê Nacional  
Antônio Carlos Pedroza (UnB)  
Gil Aquino de Farias (UFC)  
José David M. Vianna (UFBA/UnB)  
Paulo M.V.B. Barone (UFJF)  
Pedro Venezuela (UFF)  
Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP)  
Willian Rocha (UFPE)

Salvador, Bahia  
Período de 11 a 16 de julho de 2004.

**2g - Projetos de Pós-Doutorado:**

**Concluídos**

**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. nº 02/02335-5  
Processo USP nº 2002.1.16259.1.0  
Primeira Vigência: 1º maio de 2002 - 30 de abril de 2003  
Segunda Vigência: 1º maio de 2003 - 30 de abril 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. nº 02/00720-9  
Processo USP nº 2002.1.16261.1.5  
Primeira Vigência: 1º de maio de 2002 - 30 de abril de 2003  
Segunda Vigência: 1º de maio de 2003 - 30 de abril de 2004  
Terceira Vigência: 1º de maio de 2004 - 30 de abril de 2005

CANCELAMENTO A PARTIR DE 1º.11.2004.

**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

Terceira Vigência: 1º de junho de 2004 - 31 de maio de 2005

CANCELAMENTO A PARTIR DE 1º.10.2004. APROVADO EM CONCURSO DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO VALE DO SÃO FRANCISCO.

**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

CANCELAMENTO A PARTIR DE 1º.04.2004.

**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

Segunda Vigência: 1º de abril de 2004 - 31 de março de 2005

CANCELAMENTO A PARTIR DE 1º.04.2004. APROVADO EM CONCURSO DA UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA.

**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. n° 02/09268-1

Processo USP n° 2003.1.3617.1.1

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

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

CANCELAMENTO A PARTIR DE 1º.04.2004, EM VIRTUDE DE SUA TRANSFERÊNCIA PARA A UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO, COM UMA BOLSA DE FIXAÇÃO DE DOUTORES (PROSET) DO FUNDO SETORIAL CT-ENERG.

**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/SiO<sub>2</sub>

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/SiO<sub>2</sub> e de Estruturas de Si em Matrizes de SiO<sub>2</sub>.

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

INTERRUPÇÃO A PARTIR DE 1º.03.2004. SOLICITAÇÃO DE CANCELAMENTO, A PARTIR DO INÍCIO DE AGOSTO DE 2004.

### Em andamento

**Dra. Ana Lúcia Brandl.**

Laboratório de Materiais Magnéticos (LMM)

Supervisor: Prof. Dr. Gerardo Fabián Goya

Título do Projeto: Estudo das Propriedades Magnéticas de Nanopartículas

Biocompatíveis de Gamma Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> e Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>.

Bolsa FAPESP - Proc. n° 04/01474-7

Processo USP n° 2004.1.23415.1.6.

Primeira Vigência: 1° de julho de 2004 - 30 de junho de 2005.

**Dr. Ênio Lima Jr.**

Laboratório de Materiais Magnéticos (LMM)

Supervisor: Prof. Dr. Gerardo Fabián Goya

Título do Projeto: Molecule-Based Synthesis of Nanophase Materials: Magnetic Interactions in Nanoparticles and Films

Outorgante: DFMT-IFUSP (convênio entre o IFUSP e o Institut für Neue Materialien - Saabrücken - Alemanha).

Processo USP n° 2004.1.6701.1.4

Primeira Vigência: 1º de fevereiro de 2004 - 30 de janeiro de 2005

**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. nº 00/12127-5

Processo USP nº 2000.1.18223.1.2

Primeira Vigência: 1º de junho de 2001 - 31 de maio de 2002

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

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

Quarta Vigência: 1º de junho de 2004 - 31 de maio de 2005

**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 Frequências

Bolsa FAPESP - Proc. nº 02/14084-7

Processo USP nº 2003.1.31818.1.8

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

Segunda Vigência: 1º de outubro de 2004 - 30 de setembro de 2005

**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. nº 02/14010-3.

Processo USP nº 2003.1.15426.1.1

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

Segunda Vigência: 1º de maio de 2004 - 30 de abril de 2005

**Dr. Maurice de Koning**

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Supervisor: Prof. Dr. Adalberto Fazzio

Título do Projeto: Simulação Atômica de

Propriedades Termodinâmicas e Cinéticas de

Materiais Nanoestruturados.

Bolsa FAPESP - Proc. nº 03/01243-2.

Processo USP nº 2003.1.23945.1.4

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

Segunda Vigência: 1º de julho de 2004 - 30 de junho de 2005

**Dr. Ronaldo Giro**

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Supervisora: Profa. Dra. Marília Junqueira Caldas

Título do Projeto: Estudo da Interface entre Metal e Polímero em

Dispositivos Orgânicos emissores de Luz.

Bolsa FAPESP - Proc. n° 03/12350-4

Processo USP n° 2004.1.9352.1.0

Primeira Vigência: 1° de abril de 2004 - 31 de março de 2005

**Dr. Tomás Erikson Lamas**

Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS)

Supervisor: Prof. Dr. Guennadii Michailovich Gusev

Título do Projeto: Crescimento e Aplicação de Pontos Quânticos de InAs Auto-Organizados emitindo em 1,3 e 1,55 Micrômetros.

Bolsa FAPESP – Proc. n° 03/09398-5

Processo USP n° 2004.1.21658.1.9

Primeira Vigência: 1° de junho de 2004 - 31 de maio de 2005

**Dr. Xavier Gratens**

Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas (LESBT)

Supervisor: Prof. Dr. Valdir Bindilatti

Título do Projeto: Estudo das Propriedades Ópticas, Elétricas e Magnéticas de Estruturas de Semicondutores Magnéticos Diluídos de Compostos IV-VI crescidas por MBE

Bolsa CNPq - Proc. n° 150547/2004-8

Processo USP n° 2004.1.23414.1.0

Primeira Vigência: 1° de julho de 2004 - 30 de junho de 2005

## **2h - Doutorados:**

### **Concluídos:**

#### **“Epitaxia por Feixe Molecular de Camadas dopadas do Tipo P para a Construção de Dispositivos Optoeletrônicos”**

Tomás Erikson Lamas

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Prof. Alain André Quivy

Data: 26.05.2004

#### **“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

Data: 12.04.2004

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

Adriano Manoel dos Santos

Financiadora: CAPES

Orientador: José Roberto Leite

Data: 23.04.2004

**“Crescimento e Caracterização de GaN dopado com Carbono e de Ligas de InGaN não dopadas na Fase Cúbica”**

David Gregório Pacheco Salazar

Financiadora: FAPESP

Orientador: José Roberto Leite

Orientadora: Luísa Maria Ribeiro Scolfaro (a partir de julho de 2004)

Data da defesa: 26.11.2004

**“Estudo de Ligações de Hidrogênio via Métodos de Química Quântica e via Teoria do Funcional da Densidade”**

Eduardo Augusto Rissi

Financiadora: FAPESP

Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

Data: 31.05.2004

**“Moléculas em Aglomerados e em Meio Líquido”**

Eudes Eterno Fileti

Financiadora: FAPESP

Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

Data: 15.12.2004

**“Estudo Experimental em Semicondutores Magnéticos e Semicondutores Magnéticos Diluídos do Tipo II-III<sub>2</sub>-VI<sub>4</sub>”**

John Carlos Mantilla Uchoa

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Valdir Bindilatti

Data: 21.09.2004

Em Andamento:

**“Estudo Teórico da Reação de Moléculas de O<sub>2</sub> com a Superfície de SiC”**

Frederico Dutilh Novaes

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Adalberto Fazzio

**“Estudo Teórico da Adsorção de Átomos e Moléculas em Superfícies de Cristais do Tipo IV e IV-IV”**

Jeverson Teodoro Arantes Jr.

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Adalberto Fazzio

**“Sintonia das Propriedades Ópticas e Elétricas de Super-Rede Semicondutoras com Dopagem Modulada”**

Ricardo Faveron de Oliveira

Fonte Financiadora: CAPES

Orientador: André Bohomoletz Henriques

**“Exchange Bias e Relaxação em Bicamadas Magnéticas”**

Ângela Dayana Barra Barrera

Fonte Financiadora: FAPESP

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

**“Anisotropia Estrutural e Magnética em Filmes Finos e Multicamadas por Espectroscopia de Absorção e Refletividade no Domínio dos Raios X”**

Narcizo Marques de Souza Neto

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Antônio Domingues dos Santos

**“Estudo Teórico de Nanofios Semicondutores”**

Cedric Rocha Leão

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Antônio José Roque da Silva

**“Adsorção de O<sub>2</sub> em Nanotubos de Carbono e Propriedades de Sólidos de Fullerenos”**

Ivana Zanella da Silva

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Antônio José Roque da Silva

**“Estudo Teórico de Dispositivos Moleculares”**

Renato Borges Pontes

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Antônio José Roque da Silva

**“Magnetização Remanescente em Sistemas Antiferromagnéticos Diluídos”**

Zulmara Virginia de Carvalho

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Carlos Castilla Becerra

**“Estudo das Propriedades Estruturais e Magnéticas de Semicondutores Magnéticos diluídos Baseados em GaN Cúbico e Hexagonal”**

Celso de Araújo Duarte

Fonte Financiadora: CNPq  
Orientadora: Euzi Conceição Fernandes da Silva  
Orientador: Guennadii Michailovich Gusev (a partir de julho de 2004)

**“Caracterização de Heteroestruturas Semicondutoras utilizadas na Fabricação de Fotodetectores operando na Faixa de Micrômetros”**

Ivan Ramos Pagnossin  
Agência Financiadora: FAPESP  
Orientadora: Euzi Conceição Fernandes da Silva  
Orientador: Guennadii Michailovich Gusev (a partir de dezembro de 2004)

**“Magnetotransporte em Poços Quânticos de AlGaAs/GaAs com Diferentes Formas de Potencial”**

Niko Churata Mamani  
Agência Financiadora: FAPESP  
Orientador: Guennadii Michailovich Gusev

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

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 de Poços Quânticos de AlGaIn/GaN”**

Ángela Maria Ortiz de Zevallos Marquez  
Fonte Financiadora: CNPq  
Orientador: José Roberto Leite  
Orientadora: Luísa Maria Ribeiro Scolfaro (a partir de julho de 2004)

**“Propriedades Ópticas dos Nitretos GaN, InGaN e AlGaN na Estrutura Cúbica”**

Odille Cué Noriega  
Fonte Financiadora: FAPESP  
Orientador: José Roberto Leite  
Orientadora: Luísa Maria Ribeiro Scolfaro (a partir de julho de 2004)

**“Propriedades óticas dos nitretos GaN, InGaN e AlGaN na estrutura cúbica”**

Odille Cue Noriega  
Financiadora: sem bolsa  
Orientador: Prof. José Roberto Leite  
Orientadora: Prof<sup>a</sup>. Luisa Maria Ribeiro Scolfaro (a partir de julho de 2004)



**“Estudo das Propriedades Estruturais, Eletrônicas e Ópticas em Semicondutores HgI<sub>2</sub>”**

Frederico Ayres de Oliveira Neto

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientadora: Lucy Vitória Credidio Assali

**“Propriedades Físicas de Impurezas relacionadas com Níquel e Cobalto em Diamante”**

Rolando Larico Mamani

Fonte Financiadora: CNPq

Orientadora: Lucy Vitória Credidio Assali

**“Propriedades Estruturais, Eletrônicas e Termodinâmicas de Ligas Quaternárias de AlGaInN”**

Marcelo Marques

Agência Financiadora: FAPESP

Orientadora: Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

**“Modelagem Teórica de Estados Ionizados em Complexos de Silício”**

Henady Malarenko Junior

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 da Interface Polímero-Substrato em Eletrônica Molecular”**

Marcelo Alves dos Santos

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientadora: Marília Junqueira Caldas

**“Instalação Criogênica de uma Antena Gravitacional de Baixíssima Temperatura”**

Sérgio Turano de Souza

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Nei Fernandes de Oliveira Junior

**“Propriedades Intergranulares de óxidos cerâmicos”**

Alessandro de Souza Carneiro

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Renato de Figueiredo Jardim

**“Separação de Fases e Magnetorresistência em Manganitas”**

José Antonio de Souza

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Renato de Figueiredo Jardim

**“Utilização de Simulação Computacional para Estudar Segregação Molecular em Líquidos de Misturas Binárias”**

Moisés Román Parisuaña Ito

Fonte Financiadora: CLAF

Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

**“Estudo de Ligações de Hidrogênio e Propriedades Eletrônicas de Moléculas e Biomoléculas em Solução Aquosa”**

Thaciana Valentina Malaspina Fileti

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

**“Estudos Ab Initio de Espectroscopia Molecular”**

Valdemir Eneias Ludwig

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

**2i - Mestrados:**

Concluídos:

**“Propriedades de Transporte Elétrico de Gases Bidimensionais de Elétrons nas Proximidades de Pontos-Quânticos de InAs”**

Ivan Ramos Pagnossin

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientadora: Euzi Conceição Fernandes da Silva

Data: 29.04.2004

**“Propriedades de Transporte Elétrico de Gases Bidimensionais de Elétrons nas Proximidades de Pontos-Quânticos de InAs”**

Ivan Ramos Pagnossin

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientadora: Euzi Conceição Fernandes da Silva

Data: 29.04.2004

**“Interação de Quadrupolo Nuclear em Complexos envolvendo Metais”**

Sandro Pereira Vilela

Orientadora: Helena Maria Petrilli

Fonte Financiadora: CNPq

Data: 04.03.2004

Em Andamento:

**“The Atomic Scale Analysis of Semiconductor Materials with Scanning Probes”**

Aron Wierts

Eindhoven University, COBRA Inter-university Research Institute, Department of Physics, Eindhoven, Holanda

Orientador: Paul M. Koenraad

Co-Orientador: André Bohomoletz Henriques

**“Interação de Exchange e Éxcitons Magnéticos de Spin polarizado em Calcógenos de Európio”**

Maurício Alarcon Manfrini

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: André Bohomoletz Henriques

**“Estudo Teórico da Evolução Dinâmica de Nanofios de Prata e Ouro”**

Edwin Hobi Jr.

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Antônio José Roque da Silva

**“Método de Monte Carlo utilizando Cálculos de Energia Total Ab Initio”**

Luana Sucupira Pedroza

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Antônio José Roque da Silva

**“Estudo de Primeiros Princípios do Mecanismo de Adsorção da Molécula de O<sub>2</sub> sobre a Superfície de 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 Marinhos da Baixada Santista - SP: Um Estudo de Magnetismo Ambiental”**

Fábio de Oliveira Jorge

Fonte Financiadora: s/bolsa

Orientador: Carmen Silvia de Moya Partiti

**“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 yFeO<sub>3</sub> e Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>”**

Waldir Leles Martins Filho

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Gerardo Fabián Goya

**“Investigação de Complexos Organometálicos através de Cálculos Ab Initio”**

Marcos Brown Gonçalves

Fonte Financiadora: sem bolsa

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

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

Herbert de Castro Georg

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientadora: Kaline Rabelo Coutinho

**“Estudo da Estrutura Eletrônica e das Propriedades Óticas de  $\text{SrTiO}_3$  e  $\text{HfO}_3$ ”**

Joelson Cott Garcia

Fonte Financiadora: CAPES

Orientadora: Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

**“Estudo dos Compostos Semicondutores de MT-Grupo V para Aplicação em Spintrônica”**

Mauro Fernando Soares Ribeiro Jr.

Fonte Financiadora: CNPq

Orientadora: Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

**“Modelos para Automontagem de Moléculas em Superfícies”**

Alexandre Martins Mélo

Fonte Financiadora: CNPq

Orientadora: Marília Junqueira Caldas

**“Interações Cristalinas em Oligômeros de Tiofeno”**

Benedito Maurício da Silva

Fonte Financiadora: CNPq

Orientadora: Marília Junqueira Caldas

**“Propriedades Eletrônicas de Polímeros da Família dos Fluorenos”**

Marcelo Luiz da Silva

Financiadora: CAPES

Orientadora: Marília Junqueira Caldas

**“Transporte Eletrônico em Multicanais Desordenados”**

Marcelo Maia Garcia

Financiadora: CNPq

Orientadora: Marília Junqueira Caldas

**“Medidas de Transporte sob Pressão em Compostos com Transições de Fase Tipo Metal-Isolante”**

Solange de Andrade

Financiadora: CNPq

Orientador: Renato de Figueiredo Jardim

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

Sueli Hatsumi Masunaga

Financiadora: CNPq

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:**

**“Implementação do Controle de Temperatura das Células de Efusão de um Sistema de Epitaxia por Feixe Molecular”**

Fernando Rodrigues da Silva

Agência Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientador: Alain André Quivy

Ano: 2004

**“Estudo da Difusão de Au e O<sub>2</sub> em Nanotubos de Carbono Utilizando o Método de Monte Carlo Cinético”**

Mariana Rossi Carvalho

Financiadora: CNPq

Orientadora: Antônio José Roque da Silva

Ano: 2004

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

Marcel Henrique Toniolo Galina

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientadora: Helena Maria Petrilli

Ano: 2004

**“Estudo do Magnetismo em Nanopartículas de Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> em Ferrofluidos”**

Amanda Defendi Arelaro

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Gerardo Fabián Goya

Ano: 2004

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

Marco Aurélio Poles de Souza

Fonte Financiadora: sem bolsa

Orientadora: Lucy Vitória Credidio Assali

Ano: 2004 (1º.08)

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

Rafael Dias Menezes

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientadora: Lucy Vitória Credidio Assali

Ano: 2004

**“Utilização do Método do Passeio Aleatório: Difusão e Recombinação”**

Carlos Felipe Alves dos Santos

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientadora: Marília Junqueira Caldas

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

Rodrigo Ramos da Silva

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientadora: Marília Junqueira Caldas

Ano: 2004

**“Introdução à Estrutura Eletrônica: aproximação de Hückel para Sistemas Conjugados”**

Ronaldo Alves Batista

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientadora: Marília Junqueira Caldas

Ano: 2004

**“Desenvolvimento e Aplicação de Software para Estudar Propriedades Eletrônicas de Líquidos Moleculares”**

Reynaldo Matos Hortensi

Financiadora: CNPq

Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

### **3 - ATIVIDADES DE EXTENSÃO E GESTÃO ACADÊMICA**

#### **3a - Atividades Administrativas Institucionais:**

**Adalberto Fazzio**

Membro da Congregação do IFUSP.

Membro do Conselho do Departamento.

**André Bohomoletz Henriques**

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

**Antônio Domingues dos Santos**

Membro da Comissão de Coordenação do Bacharelado (CoC-B) do IFUSP.

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

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

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 15.12.2004).

Representante do Departamento junto à Comissão de Pesquisa do IFUSP (mandato: 16.12.2004 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 (mandato: de 09.12.2003 a 08.12.2005).

Presidente da Comissão de Pós-Graduação do IFUSP (mandatos: 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 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 Apoio Profissional (mandato: de 02.03.2004 a 1º.03.2006).

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.

**Carmen Silvia de Moya Partiti**

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 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).  
Representante Suplente do Departamento junto à Comissão Assessora de Cultura e Extensão Universitária do IFUSP. Portaria IF 07/04 de 28.05.2004 (mandato: de 28.05.2004 a 20.09.2005).

**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: a partir de 22.10.2002).

**Gerardo Fabián Goya**

Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 12.03.2003 a 11.03.2005).  
Representante Suplente do Departamento junto à Comissão da Biblioteca (mandato: de 1º.11.2004 a 30.10.2005).  
Representante Suplente do Departamento junto à Comissão de Pesquisa do IFUSP (mandato: 22.12.2004 a 21.11.2005).

**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 08.10.2003 a 07.10.2005).



**Helena Maria Petrilli**

Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: 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).

Representante do Grupo Teórico do DFMT no Programa a USP e as Profissões.

**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: de 2003 a 2004).

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).

**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).

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

Membro do Conselho do Departamento (mandato: 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).

Representante Suplente do Departamento junto à Comissão Assessora de Cultura e Extensão Universitária do IFUSP. Portaria IF 07/04 de 28.05.2004 (mandato: a partir de 25.11.2004).

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

### **Marília Junqueira Caldas**

Membro da Congregação do IFUSP.

Membro do Conselho do Departamento.

Membro Suplente do Conselho Técnico Administrativo do IFUSP (mandato: de 23.02.2004 a 22.02.2006).

Representante do Departamento junto à Comissão Assessora de Cultura e Extensão Universitária do IFUSP. Portaria IF 07/04 de 28.05.2004 (mandato: a partir de 28.05.2004).

Representante do IFUSP junto ao Centro Interunidades de História da Ciência (mandato: a partir de janeiro de 2003).

Suplente do Chefe do Departamento (mandato: de 23.02.2004 a 22.02.2006).

### **Nei Fernandes de Oliveira Jr.**

Coordenador do Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas.

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).

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

### **Renato de Figueiredo Jardim**

Membro da Câmara de Avaliação do Conselho de Graduação da Universidade de São Paulo.

Membro da Câmara Curricular e do Vestibular do Conselho de Graduação da Universidade de São Paulo.

Membro da Congregação do IFUSP.

Membro do Conselho de Graduação da Universidade de São Paulo.

Membro do Conselho do Departamento, como Professor Titular, a partir de 13.10.2004.

Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 08.10.2003 a 12.10.2004).

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

### **Sylvio Roberto Accioly Canuto**

Chefe do Departamento (mandato: de 23.02.2004 a 22.02.2006).

Membro da Congregação do IFUSP.

Membro do Conselho do Departamento.

Membro do Conselho Técnico Administrativo do IFUSP (mandato: de 23.02.2004 a 22.02.2006).

Membro Titular do Conselho da Sociedade Brasileira de Física.

Representante do Departamento junto à Comissão de Pesquisa do IFUSP (mandato: (mandato: 22.11.2003 a 12.11.2004).

**Valdir Bindilatti**

Membro Titular do Conselho do Departamento (a partir de 13.10.2004 até 07.10.2005).

Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 08.10.2003 a 12.10.2004).

Representante Suplente do Departamento junto à Comissão de Informática do IFUSP (mandato: de 22.08.2003 a 21.08.2005).

**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, Applied Physics Letters, Chemical Physics Letters e Physics Letters.

**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 B, Physical Review Letters, Solid State Communications, Journal of Applied Physics

**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.

Assessoria *ad hoc* prestada: CNPq e CAPES.

**Euzi Conceição Fernandes da Silva**

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.

Arbitragem 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.

**Gerardo Fabián Goya**

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, CNPq, FONCyT (Argentina), FUNCITEC - Fundação de Ciência e Tecnologia de Santa Catarina, LNLS – Laboratório Nacional de Luz Síncrotron.

Referee of Canadian Journal of Physics.; Applied Thermal Engineering; IEEE Transactions on Magnetics.; Physica B.;Physica Statu Solidi.

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.

**Guennadii Michailovich Gusev**

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.

Arbitragem para: Physical Review B, Physical Review Letters, Journal of Physics Condensed Matter e Brazilian Journal of Physics.

**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, Acta Polonia e Journal of Non Crystalline Solids.

**Hercílio Rodolfo Rechenberg**

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

Arbitragem para: Physical Review B e Physica Status Solidi.

**José Roberto Leite**

Assessoria *ad hoc* 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.

Arbitragem para: Physical Review, Physical Review Letters, Solid State Communications, Applied Physics Letters, Modern Physics Letters B, International Journal of Modern Physics B, Brazilian Journal of Physics, Physica Status Solidi, 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 Microstructures.

**Marília Junqueira Caldas**

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

Arbitragem para: Physical Review B, Solid State Communications, Physical Review Letters e Journal of Chemical Physics.

**Nei Fernandes de Oliveira Jr.**

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

**Renato de Figueiredo Jardim**

Assessoria *ad hoc* prestada a FACEPE, FAPESP, CAPES, FUNDUNESP, NSF (USA), CNPq, MCT, FINEP, ANPCYT (Argentina).

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, Material Letters, Materials Research, Physica C, Physica Status Solidi (b), Physics Letters A, Physical Review B, Physical Review Letters e Solid State Communications.

Assessoria prestada ao Programa de Pós-Graduação em Química Fundamental IQ-USP.

Assessoria prestada à Câmara Curricular e do Vestibular Conselho de Graduação da USP.

Assessoria prestada ao Programa de Pós-Graduação em Ciências dos Materiais IF-São Carlos.

Assessoria prestada ao Programa de Pós-Graduação em Física IF Gleb Wataghin-UNICAMP.

Assessoria prestada ao Programa de Pós-Graduação em Física IFUSP.

**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, Chemical Physics Letters, 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, Química Nova, Revista Brasileira de Ensino de Física, Modern Physics Letters, Journal of Food and Agricultural Chemistry, Journal of Colloids.

**Valdir Bindilatti**

Assessoria prestada: FAPESP e CNPq.

Arbitragem para: Physical Review B.

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

**Adalberto Fazzio**

“Simulação Computacional em Física de Materiais” - Palestra Convidada, Workshop em Cerâmicas Nanoestruturadas e Interfaces, Universidade Federal de São Carlos, São Paulo (15 de junho de 2004).

“Física Molecular, Ciência de Materiais e Biofísica: Estado da Arte e Perspectivas” - Mesa-Redonda, IX Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, Salvador, Bahia (julho de 2004).

“Semicondutores Semimagnéticos” - Palestra, IX Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, Salvador, BA (julho de 2004).

“Uma Possível Rota para Crescer Semicondutores Magnéticos Baseada no Silício” - Palestra Convidada IX Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, Salvador, Bahia (julho de 2004).

“A Possible Route to Grow a  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ : Mn Based Diluted Magnetic Semiconductor” - Invited Speaker, International Conference on Superlattices, Nano-Structures and Nano-Devices - ICSNN04, Cancún, México (22 de julho de 2004).

“Funcionalização de Nanotubos de Carbono em Superfície de Silício” -Palestra, Universidade Estadual de Feira de Santana, Bahia (agosto de 2004).

“Nanociência e Nanotecnologia” - Palestra, Universidade Estadual Paulista - UNESP, Guaratinguetá, São Paulo (25 de agosto de 2004).

“Simulação Computacional em Nanomateriais” - Palestra, VIII Workshop de Pós-Graduação em Física, Universidade de São Paulo, Instituto de Física de São Carlos - IFSC, São Carlos, São Paulo (29 de setembro de 2004).

“Cálculos Ab Initio em Ligas Semicondutoras Magnéticas” – Palestra, 1ª Escola Mato-Grossense de Física, Universidade Federal de Mato Grosso, Cuiabá, Mato Grosso (outubro de 2004).

“Nanotecnologia: Nova Fronteira do Conhecimento” - Palestra de Recepção aos Calouros em Física, Universidade Federal de Mato Grosso, Cuiabá, Mato Grosso (outubro de 2004).

“Nanociência e Nanotecnologia” - Palestra, Semana da Licenciatura, Universidade de São Paulo, Instituto de Matemática e Estatística, São Paulo (05 de outubro de 2004).

“Política de Nanociência e Nanotecnologia” - Palestra Convidada, 1ª Escola Mato-Grossense de Física, Universidade Federal de Mato Grosso, Cuiabá, Mato Grosso (18 de outubro de 2004).

“Simulação Computacional de Materiais via Cálculos de Primeiros Princípios” - Invited Talk, III Encontro do Instituto de Nanociências, Tiradentes, Minas Gerais (novembro de 2004).

“Nanociência e Nanotecnologia” - Palestra, Buenos Aires, Argentina (novembro de 2004).

“Física para o Brasil” - Palestra de Abertura da IX Semana da Física, Universidade Estadual de Londrina, Paraná (08 de novembro de 2004).

“Atividades da Sociedade Brasileira de Física no Ano Mundial da Física” - Seminário, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, São Paulo (17 de dezembro de 2004)

“Correções de Auto-Interação na DFT” - Seminário, Workshop 40 Anos DFT Teoria do Funcional da Densidade, Universidade de São Paulo, Instituto de Física de São Carlos - IFSC, São Carlos, São Paulo (18 de dezembro de 2004).

**Antônio Domingues dos Santos**

“Magnetoóptica Aplicada à Caracterização de Materiais Magnéticos em Escala Microscópica” - Palestra, Reunião de Nanociência e Nanotecnologia Brasil-França, CNPq, Brasília, DF (11 de maio de 2004).

“Uso de Microscopia de Campo Próximo para o Estudo de Micro e Nano Objetos” - Palestra, Workshop em Nanomagnetismo: Desafios e Perspectivas, CBPF, Rio de Janeiro, RJ (24 e 25 de junho de 2004).

“SNOM + Plasmons de Superfície + microSQUID, uma Rota ao Nanomagnetismo”, Palestra, Departamento de Física da Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, RS (30 de setembro de 2004).

**Antônio José Roque da Silva**

“A Física Moderna Através do Estado Sólido” - Colóquio ‘Convite à Física,’ Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo (25 de agosto de 2004).

“Pseudopotenciais e Aplicações da DFT a Sistemas Grandes” - Seminário, Workshop 40 Anos DFT Teoria do Funcional da Densidade, Universidade de São Paulo, Instituto de Física de São Carlos - IFSC, São Carlos, São Paulo (18 de dezembro de 2004).

**Armando Corbani Ferraz**

“Novas Normas da Pós-Graduação do IFUSP para o Mestrado e o Doutorado” - Colóquio, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo (27 de maio de 2004).

**Guennadii Michailovich Gusev**

“Anomalous Hall effect in a wide parabolic well” - Invited Talk, 3<sup>rd</sup> Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures Materials, Salvador, BA (24 a 27 de março de 2004).

**Lucy Vitória Credidio Assali**

“Transition metal defects in diamond and silicon carbide” - Seminário, INFM - National Center on nanoStructures and bioSystems at Surfaces (S3), Department of Physics, University of Modena and Reggio Emilia, Modena, Itália. (07 de setembro de 2004).

“O Método LAPW e Aplicações” - Seminário, Workshop 40 Anos DFT - Teoria do Funcional da Densidade, Instituto de Física de São Carlos - IFSC-USP, SP (18 de dezembro de 2004).

**Marília Junqueira Caldas**

“Eletrônica Molecular: Modelagem Teórica de Polímeros para Emissão de Luz” (série de 3 aulas) - Curso de Verão organizado pelo Instituto de Física da Universidade de São Paulo (18 a 20 de fevereiro de 2004).



"A Física Quântica e a Nova Eletrônica: Tudo de Plástico!" - "Física ao Entardecer"  
- Palestras do Instituto de Física Teórica da UNESP (20 de agosto de 2004).

"De Navio, da Ciência Medieval à Ciência Moderna" - Convite à Física - Colóquios dedicados aos alunos ingressantes de 2004, organizados pelo Departamento de Física Matemática do IFUSP (20 de outubro de 2004).

"Propriedades Optoeletrônicas de Polímeros Conjugados" - Conferencista convidada, "III Encontro do Instituto de Nanociências - Programa Institutos do Milênio - MCT (UFMG)" (16 a 19 de novembro de 2004).

"Estados Excitados de Sistemas Infinitos: O Tratamento GW + Bethe Salpeter" - Seminário, Workshop 40 anos Teoria do Funcional da Densidade, IFSC-USP (18 de dezembro de 2004)

#### **Nei Fernandes de Oliveira Jr.**

"O que é Necessário para Formar um Físico" - Palestra Disciplina PAE, Universidade de São Paulo, Instituto de Física (06 de outubro de 2004).

"Estruturas do Processo de Magnetização em Ultrabaixas Temperaturas: Aventuras de um Grupo Experimental" - Seminário, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, Departamento de Física Geral, Grupo de Física Estatística (24 de novembro de 2004).

#### **Renato de Figueiredo Jardim**

"Primeiro Workshop em Cerâmicas Nanoestruturas e Interfaces" —Mesa-Redonda, RCNI na Universidade Federal de São Carlos, São Paulo (15 de junho de 2004).  
Data: 15 de junho de 2004.

"Supercondutores Óxidos" - Colóquio, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, Pernambuco (Período: de 17 a 18 de junho de 2005).  
Data: 17 e 18 de junho de 2004.

#### **Sylvio Roberto Accioly Canuto**

"Theoretical Studies of the Spectroscopic Properties of Molecules in Solution. Solvents as Explicit Liquids", Plenary Speaker, Third International Meeting on Photodynamics, Havana, Cuba (16 de fevereiro de 2004).

"Forças Intermoleculares e Métodos Quânticos" - Palestra Convidada, II Escola de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos, Petrópolis, Rio de Janeiro (21 de abril de 2004).

"Moléculas e Biomoléculas em Meio Aquoso" – Seminário, Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP (17 de agosto de 2004).

“Liquid Confinement: Molecular Properties and Spectroscopy in Solution” - Palestra, II Workshop em Física Molecular e Espectroscopia, Niterói, Rio de Janeiro (03 de dezembro de 2004).

“DFT na Química Quântica” - Palestra, Workshop 40 Anos DFT Teoria do Funcional da Densidade, Universidade de São Paulo, Instituto de Física de São Carlos - IFSC, São Carlos, São Paulo (18 de dezembro de 2004).

### **3d - Participação de Docentes em Concursos no IFUSP como Candidatos:**

**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 017/03)**

**Candidatos:**

- 1. Dr. João Paulo Sinnecker**
- 2. Dr. Juan López Linares**
- 3. Dr. Daniel Reinaldo Cornejo**
- 4. Dr. Flávio Garcia**

**Candidato indicado:**

**Dr. Daniel Reinaldo Cornejo**

**Banca:**

Carlos Castilla Becerra (IFUSP)  
Mário Norberto Baibich (IF-UFRGS)  
Nei Fernandes de Oliveira Jr. (Presidente) (IFUSP)  
Roberto Bechara Muniz (IF-UFF)  
Waldemar Augusto de Almeida Macedo (CDTN)

**Período:** de 05 a 06.04.2004

**Homologação:** 27.05.2004

**CONCURSO PÚBLICO PARA O PROVIMENTO DE DOIS CARGOS DE PROFESSOR TITULAR, REF. MS-6, EM RDIDP, JUNTO AO DEPARTAMENTO DE FÍSICA DOS MATERIAIS E MECÂNICA (Edital IF 019/04)**

**Candidatos:**

1. Prof. Dr. Guennadii Michailovich Gusev
2. Profa. Dra. Maria Cecília Barbosa da Silveira Salvadori
3. Prof. Dr. Renato de Figueiredo Jardim
4. Profa. Dra. Maria Cristina dos Santos (IF-UNICAMP)
5. Prof. Dr. André Bohomoletz Henriques

**Candidatos indicados:**

1. Prof. Dr. Renato de Figueiredo Jardim
2. Profa. Dra. Maria Cristina dos Santos

**Período:** de 07 a 08.06.2004

**Homologação:** 24.06.2004

**Disciplina:**

Introdução à Física do Estado Sólido I (FMT5814)

**Banca:**

Adalberto Fazzio (Presidente) (IFUSP)  
Alberto Passos Guimarães (CBPF)  
Fernando Cláudio Zawislak (IF-UFRGS)  
Múcio Amado Continentino (IF-UFF)  
Paulo César Moarais (IF-UnB)

**CONCURSO DE LIVRE-DOCÊNCIA JUNTO AO DEPARTAMENTO DE FÍSICA DOS MATERIAIS E MECÂNICA (Edital IF 001/04)**

1. Candidata: Profa. Dra. Euzi Conceição Fernandes da Silva

**Disciplina:**

Introdução à Física do Estado Sólido I (FMT5814)

**Banca:**

Antônio Ferreira da Silva (DFG-UFBa)  
Inês Pereyra (EPUSP)  
Ivan Costa da Cunha Lima (IF-UERJ)  
Nei Fernandes de Oliveira Jr. (Presidente) (IFUSP)  
Oscar Nassif de Mesquita (DF-UFMG)

**Período:** de 09 a 11.02.2004

**Homologação:** 25.03.2004

## **2. Candidato: Dr. Valmir Antônio Chitta**

### **Disciplina:**

Introdução à Física do Estado Sólido I (FMT5814)

### **Banca:**

Alfredo Gontijo Oliveira (DF-UFMG)  
Antônio Martins Figueiredo Neto (IFUSP)  
Eliermes Arraes Meneses (IF-UNICAMP)  
Hercílio Rodolfo Rechenberg (Presidente) (IFUSP)  
Lidério Citrângulo Ioriatti Jr. (IFSC/USP)

**Período:** de 22 a 24.09.2004

**Homologação:** 28.10.2004

## **3e - Participação em Comissões Julgadoras no IFUSP:**

### **Adalberto Fazio**

Concurso Público para o provimento de dois Cargos de Professor Titular, Ref. MS-6, em RDIDP, junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica (edital IF 019/04).

Inscritos: Profs. Drs. Guennadii Michailovich Gusev, Maria Cecília Barbosa da Silveira Salvadori, Renato de Figueiredo Jardim, Maria Cristina dos Santos (IF-UNICAMP) e André Bohomoletz Henriques.

Indicados: Profs. Drs. Renato de Figueiredo Jardim e Maria Cristina dos Santos.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazio (Presidente) (IFUSP), Alberto Passos Guimarães (CBPF), Fernando Cláudio Zawislak (IF-UFRGS), Múcio Amado Continentino (IF-UFF) e Paulo César Moarais (IF-UnB).

Período: de 07 a 08.06.2004.

**Antônio Domingues dos Santos**

Alessandro Martins (Tese de Doutorado).

Título: “Desenvolvimento do Processo de Produção e Estudo Estrutural e Magnético de Filmes Finos Ordenados de FePt”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Aline Yvette Ramos (LNLS), Antônio Domingues dos Santos (IFUSP) (Orientador), Helena Maria Petrilli (IFUSP), João Edgar Schmidt (UFRGS) e Luiz Carlos Sampaio Lima (CBPF).

Data: 12 de abril de 2004.

Ivan Helmuth Bechtold (Tese de Doutorado).

“Efeitos de Superfície e de Confinamento na Ordem Orientacional de Cristais Líquidos”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Domingues dos Santos (IFUSP), Elisabeth Andreoli de Oliveira (IFUSP) (Orientadora), José Alberto Giacometti (UNESP), Rosângela Itri (IFUSP) e Wagner Figueiredo (UFSC).

Data: 28 de junho de 2004.

**Antônio José Roque da Silva**

Processo Seletivo para a contratação de um Docente na Categoria de Auxiliar de Ensino (Claro Temporário), Ref. MS-1, em Regime de Turno Completo, junto ao Departamento de Física Nuclear (edital AAA/IF/054/2004).

Inscritos: Drs. Evaldo Ribeiro, Alexandre Alarcon do Passo Suaide, Sergio Leonardo Gómez, Márcia Maria de Moura, Jun Takahashi, Valmir Antônio Chitta, Marlete Pereira Meira Assunção, Leila Thomazelli Thiegui, Gilberto Francisco de Lima, Luis Humberto Avanci, Sarah Isabel Pinto Monteiro do Nascimento Alves e Ana Cecília de Souza Lima.

Indicado: Dr. Alexandre Alarcon do Passo Suaide.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio José Roque da Silva (IFUSP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP) (Presidente), Marcos Nogueira Martins (IFUSP) e Ricardo Magnus Osório Galvão (IFUSP).

Período (1º etapa): de 28 a 30 de junho de 2004.

Período (2º etapa): de 06 a 07 de julho de 2004.

Processo Seletivo para a contratação de um Docente na Categoria de Auxiliar de Ensino (Claro Temporário), Ref. MS-1, em Regime de Turno Completo, junto ao Departamento de Física Aplicada (edital AAA/IF/057/2004).

Inscritos: Drs. Theotonio Mendes Pauliquevis Jr., Marco Aurélio Granero Santos, Francis Bringas Gutiérrez, Andréa Dardes Almeida Castanho e Gesil Sampaio Amarante Segundo.

Indicado: Dr. Francis Bringas Gutiérrez.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio José Roque da Silva (IFUSP), Rosângela Itri (IFUSP) e Vito Roberto Vanin (Presidente) (IFUSP).

Período: de 03 a 05 de novembro de 2004.

Processo Seletivo para a contratação de um Docente na Categoria de Auxiliar de Ensino (Claro Temporário), Ref. MS-1, em Regime de Turno Completo, junto ao Departamento de Física Aplicada (edital AAA/IF/058/2004).

Inscritos: Drs. Theotonio Mendes Pauliquevis Jr. e Andréa Dardes Almeida Castanho.

Indicada: Dra. Andréa Dardes Almeida Castanho.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio José Roque da Silva (IFUSP) (Presidente), Artour Grigorievich Elfimov e Shiguelo Watanabe (IFUSP).

Período: de 22 a 24 de novembro de 2004.

Eudes Eterno Fileti (Tese de Doutorado).

“Moléculas em Aglomerados e em Meio Líquido”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio José Roque da Silva (IFUSP), José Manuel Riveros Nigra (IQUSP), Marcos Antônio de Castro (UFG), Rogério Custódio (IF-UNICAMP) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP) (Orientador).

Data: 15 de dezembro de 2004.

### **Carlos Castilla Becerra**

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 (edital AAA/IF/017/2003).

Inscritos: Drs. João Paulo Sinnecker, Juan López Linares, Daniel Reinaldo Cornejo e Flávio Garcia.

Presentes: Drs. Juan López Linares e Daniel Reinaldo Cornejo.

Indicado: Dr. Daniel Reinaldo Cornejo.

Comissão Examinadora; Profs. Drs. Carlos Castilla Becerra (IFUSP), Mário Norberto Baibich (IF-UFRGS), Nei Fernandes de Oliveira Jr. (Presidente) (IFUSP), Roberto Bechara Muniz (IF-UFF) e Waldemar Augusto de Almeida Macedo (CDTN).

Período: de 05 a 06 de abril de 2004.

Reginaldo de Jesus Costa Farias (Dissertação de Mestrado).

“Resistividade Elétrica de Filmes Finos Nanoestruturados de Platina e Ouro”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Carlos Castilla Becerra (IFUSP), Mauro Sérgio Dorsa Cattani (IFUSP) (Orientador) e Ronaldo Domingues Mansano (EPUSP).

Data: 11 de agosto de 2004.

### **Carmen Silvia de Moya Partiti**

Adriano Júnio Silva (Dissertação de Mestrado).

Título: “Estudo da Difusão do Calor no Ferrofluido EMG 607 através de Técnicas de Espectroscopia Fototérmica”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Carmen Silvia de Moya Partiti (IFUSP), Pedro Licínio de Miranda Barbosa (DF-UFGM) e Suhaila Maluf Shibli (IFUSP) (Orientadora).

Data: 27 de fevereiro de 2004.

### **Euzi Conceição Fernandes da Silva**

Ivan Ramos Pagnossin (Tese de Doutorado).

Título: “Propriedades de Transporte Elétrico de Gases Bidimensionais de Elétrons nas Proximidades de Pontos-Quânticos de InAs”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Euzi Conceição Fernandes da Silva (IFUSP) (Orientador), Lucy Vitória Credídio Assali (IFUSP) e Marcelo Nelson Paez Carreno (EPUSP).

Data: 29 de abril de 2004.

### **Gerardo Fabián Goya**

John Carlos Mantilla Ochoa (Tese de Doutorado).

“Estudo das Propriedades Estruturais e Magnéticas do Sistema  $Zn_{1-x}Mn_xIn_2Se_4$ ”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adilson Jesus Aparecido de Oliveira (UFSCar), Antônio Yukio Ueta (INPE), Gerardo Fabian Goya (IFUSP), Margarida Mizue Hamada (IPEN) e Valdir Bindilatti (IFUSP) (Orientador).

Data: 21 de setembro de 2004.

### **Helena Maria Petrilli**

Sandro Pereira Vilela (Dissertação de Mestrado).

Título: “Interação de Quadrupolo Nuclear em Complexos envolvendo Metais”.

Comissão Examinadora: Profas. Dras. Helena Maria Petrilli (IFUSP) (Orientadora), Alinka Lepine (IFUSP) e Maristela Olzon Monteiro Dionysio de Souza (UFSCar).

Data: 04 de março de 2004.

Alessandro Martins (Tese de Doutorado).

Título: “Desenvolvimento do Processo de Produção e Estudo Estrutural e Magnético de Filmes Finos Ordenados de FePt”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Aline Yvette Ramos (LNLS), Antônio Domingues dos Santos (IFUSP) (Orientador), Helena Maria Petrilli (IFUSP), João Edgar Schmidt (IF-UFRGS) e Luiz Carlos Sampaio Lima (CBPF).

Data: 12 de abril de 2004.

### **Hercílio Rodolfo Rechenberg**

Alfredo Rodrigues Vaz (Tese de Doutorado).

Título: “Medidas do Módulo Elástico de Filmes Finos Metálicos”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP), Frank Patrick Missell (IFUSP), Maria Cecília Barbosa da Silveira Salvadori (IFUSP) (Orientadora), Naira Maria Balzaretto (IF-UFRGS) e Patrick Bernard Verdonck (IPUSP).

Data: 22 de março de 2004.

Processo Seletivo para a contratação de um Docente na Categoria de Auxiliar de Ensino (Claro Temporário), Ref. MS-1, em Regime de Turno Completo, junto ao Departamento de Física Nuclear (edital AAA/IF/054/2004).

Inscritos: Drs. Evaldo Ribeiro, Alexandre Alarcon do Passo Suaide, Sergio Leonardo Gómez, Márcia Maria de Moura, Jun Takahashi, Valmir Antônio Chitta, Marlete Pereira Meira Assunção, Leila Thomazelli Thiegui, Gilberto Francisco de Lima, Luis Humberto Avanci, Sarah Isabel Pinto Monteiro do Nascimento Alves e Ana Cecília de Souza Lima.

Indicado: Dr. Alexandre Alarcon do Passo Suaide.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio José Roque da Silva (IFUSP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP) (Presidente), Marcos Nogueira Martins (IFUSP) Ricardo Magnus Osório Galvão (IFUSP).

Período (1º etapa): de 28 a 30 de junho de 2004.

Período (2º etapa): de 06 a 07 de julho de 2004.

Concurso de Livre-Docência (1º período de 2004), junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica (edital IF/001/04).

Candidato: Dr. Valmir Antônio Chitta.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Alfredo Gontijo Oliveira (DF-UFGM), Antônio Martins Figueiredo Neto (IFUSP), Eliermes Arraes Meneses (IF-UNICAMP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (Presidente) (IFUSP) e Lidério Citrângulo Ioriatti Jr. (IFSC/USP).

Ivan Jankov (Tese de Doutorado).

”Modificação de Superfícies Metálicas via Implantação Iônica para Tochas de Plasma e outras Aplicações”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP), Iuda Dawid Goldman Vel Lejbman (IFUSP) (Presidente da Banca), Jean Albert Bodinaud (IEE-USP) e Maximo Siu Li (IFSC/USP).

Data: 13 de dezembro de 2004.

### **José Roberto Leite**

Adriano Manoel dos Santos (Tese de Doutorado).

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

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Yukio Ueta (INPE), José Roberto Leite (IFUSP) (Orientador), Sebastião William da Silva (IF-UnB), Valder Nogueira Freire (UFC) e Valmir Antônio Chitta (IFUSP).

Data: 23 de abril de 2004.

### **Lucy Vitória Credidio Assali**

Ivan Ramos Pagnossin (Tese de Doutorado).

Título: “Propriedades de Transporte Elétrico de Gases Bidimensionais de Elétrons nas Proximidades de Pontos-Quânticos de InAs”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Euzi Conceição Fernandes da Silva (IFUSP) (Orientadora), Lucy Vitória Credidio Assali (IFUSP) e Marcelo Nelson Paez Carreno (EPUSP).

Data: 29 de abril de 2004.

Eduardo Augusto Rissi (Tese de Doutorado).

Título: “Estudo de Ligações de Hidrogênio via Métodos de Química Quântica e via Teoria do Funcional da Densidade”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Fernando Rei Ornellas (IQUSP), Klaus Werner Capelle (IFSC/USP), José R. Mohallem (DF-UFGM), Lucy Vitória Credidio Assali (IFUSP) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP) (Orientador).

Data: 31 de maio de 2004.



**Luísa Maria Ribeiro Scolfaro**

David Gregorio Pacheco Salazar (Tese de Doutorado).

“Crescimento e Caracterização de GaN dopado com Carbono e de Ligas de InGaN não Dopadas na Fase Cúbica”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Yukio Ueta (INPE), Fernando Iikawa (IF-UNICAMP), Evaldo Ribeiro (UFPR), Luísa Maria Ribeiro Scolfaro (IFUSP) (Orientadora) e Valmir Antônio Chitta (IFUSP).

Data: 26 de novembro de 2004.

**Nei Fernandes de Oliveira Jr.**

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 (edital AAA/IF/017/2003).

Inscritos: Drs. João Paulo Sinnecker, Juan López Linares, Daniel Reinaldo Cornejo e Dr. Flávio Garcia.

Presentes: Drs. Juan López Linares e Daniel Reinaldo Cornejo.

Indicado: Dr. Daniel Reinaldo Cornejo.

Comissão Examinadora; Profs. Drs. Carlos Castilla Becerra (IFUSP), Mário Norberto Baibich (IF-UFRGS), Nei Fernandes de Oliveira Jr. (IFUSP) (Presidente), Roberto Bechara Muniz (IF-UFF) e Waldemar Augusto de Almeida Macedo (CDTN).

Período: de 05 a 06 de abril de 2004.

**Sylvio Roberto Accioly Canuto**

Eduardo Augusto Rissi (Tese de Doutorado).

Título: “Estudo de Ligações de Hidrogênio via Métodos de Química Quântica e via Teoria do Funcional da Densidade”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Fernando Rei Ornellas (IQUSP), Klaus Werner Capelle (IFSC/USP), José R. Mohallem (DF-UFGM), Lucy Vitória Credidio Assali (IFUSP) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP) (Orientador).

Data: 31 de maio de 2004.

Eduardo Sérgio de Souza (Tese de Doutorado).

“Dinâmica Conformacional de Peptídeos: Um Estudo por Fluorescência”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Amando Siuiti Ito (FFCLRP/USP) (Orientador), Hidetake Imasato (IQSC/USP), Iouri Borissevitch (FFCLRP/USP), Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP) e Vera Bohomoletz Henriques (IFUSP).

Data: 05 de novembro de 2004.

Eudes Eterno Fileti (Tese de Doutorado).

“Moléculas em Aglomerados e em Meio Líquido”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio José Roque da Silva (IFUSP), José Manuel Riveros Nigra (IQUSP), Marcos Antônio de Castro (UFG), Rogério Custódio (IF-UNICAMP) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP) (Orientador).

Data: 15 de dezembro de 2004.

### **Valdir Bindilatti**

Tomás Erikson Lamas (Tese de Doutorado).

Título: “Epitaxia por Feixe Molecular de Camadas dopadas do Tipo P para a Construção de Dispositivos Optoeletrônicos”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Alain André Quivy (IFUSP) (Orientador), Eduardo Abramof (INPE), Mônica A. Cotta (UNICAMP), Patrícia Lustoza de Souza (PUC-Rio) e Valdir Bindilatti (IFUSP).

Data: 26 de maio de 2004.

John Carlos Mantilla Ochoa (Tese de Doutorado).

“Estudo das Propriedades Estruturais e Magnéticas do Sistema  $Zn_{1-x}Mn_xIn_2Se_4$ ”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adilson Jesus Aparecido de Oliveira (UFSCar), Antônio Yukio Ueta (INPE), Gerardo Fabian Goya (IFUSP), Margarida Mizue Hamada (IPEN) e Valdir Bindilatti (IFUSP) (Orientador).

Data: 21 de setembro de 2004.

Exame de Qualificação para o Doutorado.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo.

Disciplinas: Termodinâmica e Mecânica Estatística.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Mário José de Oliveira e Valdir Bindilatti.

Períodos: abril e setembro de 2004.

## **3f - Participação em Comissões Julgadoras em Outras Instituições:**

### **Adalberto Fazzio**

Concurso para o Provimento de um Cargo de Professor Adjunto, junto ao Departamento de Física da Universidade Estadual de Feira de Santana, Bahia.

Inscritos: Profs. Drs. Melquisedec Lourenço da Silva, Selma Rozane Vieira dos Santos, Luiz Alberto Terrazos Javier e Alexandre Manoel de Moraes Carvalho.

Indicado: Prof. Dr. Alexandre Manoel de Moraes Carvalho.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), Fábio de Jesus Ribeiro (UEFS) (Orientador) e Luiz Eduardo Moreira Carvalho de Oliveira (IF-UNICAMP).

Período: de 12 a 13 de agosto de 2004.

Joelmo Jesus de Oliveira (Dissertação de Mestrado - Departamento de Física da Universidade Federal da Bahia, Salvador, Bahia).

Título: “Cálculo de Propriedades Eletrônicas e Estruturais de Materiais Hipotéticos via Método Ab Initio”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), Antônio Ferreira da Silva (DF-UFBA) e Fernando de Brito Mota (DF-UFBA) (Orientador).

Data: 10 de novembro de 2004.

Rosângela de Paiva (Tese de Doutorado - Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG).

Título: “Propriedades Eletrônicas e Magnéticas de Ligas Semicondutoras Magnéticas Diluídas e de Nitretos de Metais de Transição”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), Hélio Chacham (DF-UFMG), José Luiz Aarestrup Alves (DF-UFMG) (Orientador), Roberto Alves Nogueira (DF-UFMG) (Co-Orientador) e Rogério Magalhães Paniago (DF-UFMG).

Data: 16 de dezembro de 2004.

Concurso para o Provimento de um Cargo de Pesquisador Titular I, junto ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, RJ.

Inscrito: Prof. Dr. Rubem Luis Sommer.

Indicado: Prof. Dr. Rubem Luis Sommer.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), Alba Theamann (IF-UFRGS), Aldo Felix Craievich (IFUSP) (Presidente), Frank Patrick Missell (UCS) e José D'albuquerque e Castro (IF-UFRJ).

Data: 03 de dezembro de 2004.

### **Antônio Domingues dos Santos**

Odilon Divino Damasceno Couto Jr. (Dissertação de Mestrado - Instituto de Física “Gleb Wataghin” da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP).

Título: “Filmes de MnAs sobre GaAs e Nanoestruturas de MnAs Implantadas em GaAs”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Domingues dos Santos (IFUSP), Carlos Manuel Giles A. Mayolo (IF-UNICAMP) e Maria José S.P. Brasil (IF-UNICAMP) (Orientadora).

Data: 04 de março de 2004.

Marinoel Joaquim (Dissertação de Mestrado - Departamento de Engenharia Elétrica da Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR).

Título: “Análises Teórica e Experimental de Efeitos Magnetoópticos aplicados ao Desenvolvimento de Sensores de Fibra Óptica para Medição de Corrente Elétrica”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Domingues dos Santos (IFUSP), Marlio José C. Bonfim (DF-UFPR) (Orientador) e Wilson Arnaldo Artuzi Jr. (DF-UFPR).

Márcio Assolin Correa (Dissertação de Mestrado - Departamento de Física da Universidade Federal de Santa Maria, RS).

Título: “Magnetoimpedância em Filmes Finemet/Metal/Finemet”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Domingues dos Santos (IFUSP), Celso A. Marques da Silva (DF-UFSM) e Rubem L. Sommer (DF-UFSM) (Orientador).

Data: 1<sup>o</sup> de outubro de 2004.

### **Hercílio Rodolfo Rechenberg**

Astrogildo de Carvalho Junqueira (Tese de Doutorado - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares).

Título: “Estudo de Interações Hiperfinas em Óxidos Perovskitas do Tipo La(MT)O<sub>3</sub> (MT=metais de transição Fe, Cr, Mn e Co)”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Artur Wilson Carbonari (IPEN) (Orientador), Hercilio Rodolfo Rechenberg (IFUSP), José Mestnik Filho (IPEN), Rajendra Narain Saxena (IPEN) e Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP).

Data: 23 de junho de 2004.

Paulo Rogério da Costa Couceiro (Tese de Doutorado - Departamento de Química do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG).

Título: “Características Químico-Mineralógicas de Óxidos de Ferro e Caulinita de Perfis de Solos da Região de Manaus, Amazônia”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Genilson Pereira Santana (UFAM) (Co-Orientador), Fernando Barboza Egreja Filho (DQ-UFMG), Hercilio Rodolfo Rechenberg (IFUSP), José Domingos Fabris (DQ-UFMG) (Orientador) e Nelson Gonçalves Fernandes (DQ-UFMG).

Data: 23 de agosto de 2004.

Carla da Fonseca Barbatti (Tese de Doutorado - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, RJ).

Título: “Estudo por RNM de Ligas Baseadas em Ferro produzidas pela Técnica de Resfriamento Rápido”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Affonso A. Guidão Gomes (CBPF), Alberto Passos Guimarães (CBPF) (Orientador), Amós Troper (CBPF), Armando Y. Takeuchi (CBPF), Elis Helena de Campos P. Sinnecker (Co-Orientadora), Hercilio Rodolfo Rechenberg (IFUSP), João Edgar Schmidt (IF-UFRGS) e Rosa Bernstein Scorzelli (CBPF).

Data: 12 de novembro de 2004.

### **Luísa Maria Ribeiro Scolfaro**

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

Título: “Transporte Quântico em Spintrônica: Corrente e Shot Noise via Funções de Green de Não Equilíbrio”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Enrique Victoriano Anda (PUC), José Carlos Egues de Menezes (IFSC/USP) (Orientador), Klaus Werner Capelle (IFSC/USP), Luísa Maria Ribeiro Scolfaro (IFUSP) e Mário Norberto Baibich (IF-UFRGS).

Data: 20 de dezembro de 2004.

### **Marília Junqueira Caldas**

Ronaldo Giro (Tese de Doutorado - Instituto de Física “Gleb Wataghin” da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP).

Título: “Design de Polímeros Condutores utilizando o Algoritmo Genético”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Douglas Soares Galvão (IF-UNICAMP) (Orientador), Márcio Alberto Araújo Pudensi (IF-UNICAMP), Marília Junqueira Caldas (IFUSP), Peter Alexander Bleinroth Schulz (IF-UNICAMP) e Sérgio Benites Legoas (IF-UNICAMP)

Data: 02 de março de 2004.

### **Renato de Figueiredo Jardim**

Cíntia Piamontese (Tese de Doutorado - Instituto de Física “Gleb Wataghin” da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP)

Título da tese: “Estrutura Atômica e Eletrônica em Niquelatos ( $\text{TRNiO}_3$ ) através de Espectroscopia de Níveis Profundos”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Hélio César Nogueira Tonentino (IF-UNICAMP) (Orientador), Richard Landers (IF-UNICAMP), Leandro Russovski Tessler (IF-UNICAMP), Miguel Abbate (DF-UFPR) e Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP).

Data: 18 de março de 2004.

Daniela Schittler (Dissertação de Mestrado - Departamento de Física da Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, RS)

Título: “Estudos de Primeiros Princípios de Perovskitas  $\text{RniO}_3$  ( $\text{R}=\text{Pr}$  e  $\text{Nd}$ )”.

Comissão Organizadora: Profs. Drs. Paulo César Piquini (DF-UFSM), Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP) e Sérgio Garcia Magalhães (DF-UFSM).

Data: 26 de março de 2004

Petrucio Barroso da Silva (Dissertação de Mestrado – Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE).

Comissão Examinadora: Profs. Drs. José Albino Oliveira de Aguiar (DF-UFPE) (Orientador), Renato de Figueiredo Jardim e Sérgio Galvão Coutinho (DF-UFPE).

Data: 18 de junho de 2004.

Astrogildo de Carvalho Junqueira (Tese de Doutorado - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares).

Título: “Estudo de Interações Hiperfinas em Óxidos Perovskitas do Tipo  $\text{La}(\text{MT})\text{O}_3$  ( $\text{MT}=\text{metais de transição Fe, Cr, Mn e Co}$ )”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Artur Wilson Carbonari (IPEN) (Orientador), Hercilio Rodolfo Rechenberg (IFUSP), José Mestnik Filho (IPEN), Rajendra Narain Saxena (IPEN) e Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP).

Data: 23 de junho de 2004.

Viviane Cristina Albarici (Dissertação de Mestrado - Departamento de Química da Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP).

Título: “Síntese e Caracterização de Pós  $\text{Li}_2\text{TiSiO}_5$  e  $\text{Na}_2\text{TiSiO}_5$ ”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adhemar Colla Ruvolo Filho (DQ/UFSCar), Edson Roberto Leite (DQ/UFSCar) (Orientador) e Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP).

Data: 30 de julho de 2004.

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

Título: “Relaxação Estrutural de Camadas Pseudomórficas de  $\text{SiGe}/\text{Si}(100)$  induzida por Implantação Iônica e Tratamento Térmico”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Henri Ivanov Boudinov (IF-UFRGS), Miguel Angelo Cavalheiro Gusmão (IF-UFRGS), Paulo Fernando Papaleo Fichtner (IF-UFRGS) (Orientador) e Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP).

Data: 1º de outubro de 2004.

**Sylvio Roberto Accioly Canuto**

Sheila Cristina dos Santos Costa (Dissertação de Mestrado - Departamento de Física da Universidade Federal do Pará, Belém, Pará).

Título: “Métodos Teóricos na Investigação da Estrutura Eletrônica do Resveratrol e Derivados”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Jordan Del Nero (DF-UFPA) (Orientador), Sanclayton G.C. Moreira (DF-UFPA) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP).

Data: 23 de setembro de 2004.

Concurso de Ascensão ao último nível da Carreira de Pesquisador, junto ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, RJ.

Inscritos: Profs. Drs. José Abdalla Helayel Neto, Carlton Taft e Marcelo Rebouças.

Indicados: Profs. Drs. José Abdalla Helayel Neto e Marcelo Rebouças.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Alfredo M.O. de Almeida (CBPF) (Presidente), Amir Ordacgi Caldeira (IF-UNICAMP), Reuven Opher (IAG-USP), Ricardo Schwatz Schor (DF-UFMG) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP).

Data: 16 de novembro de 2004.

Concurso para o Provimento de dois Cargos de Professor Titular, junto ao Departamento de Física e Informática do Instituto de Física de São Carlos - IFSC-USP, SP.

Inscritos: Profs. Drs. Richard Charles Garrat, Márcio José Martins, Luis Gustavo Marcassa, José Pedro Donoso Gonzalez, Luciano da Fontoura Costa, Guo-Qiang Hai e José Eduardo Martinho Hornos.

Aprovados: Profs. Drs. Richard Charles Garrat e Luciano da Fontoura Costa.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Aldo Felix Craievich (IFUSP), Hugo Aguirre Armelin (IQUSP), Luiz Nunes de Oliveira (IFSC/USP), Sérgio Carlos Zílio (IFSC/USP) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP).

Período: de 08 a 09 de dezembro de 2004.

**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

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).

Tesoureiro da Comissão da Olimpíada Brasileira de Física.

**Antônio José Roque da Silva**

Secretário Executivo da Comissão da Olimpíada Brasileira de Física.

**Helena Maria Petrilli**

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

Membro do International Advisory Committee da XIII International Conference on Hyperfine Interactions.

Vice-Chair do Comitê Internacional de Interações Quadrupolares (a partir de agosto de 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 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).

Membro do Conselho da Sociedade Brasileira de Pesquisa em Materiais (SBPMat) a partir de 2001.

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

**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.

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 Corpo Editorial da *Computer Physics Communications*.

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

Membro do Corpo Editorial da *Chemical Physics Letters* (1º.01.2004 a 31.12.2006)

Membro do International Advisory Board of the Journal of the Argentinian Chemical Society

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 - CNPq) da Universidad de Mogi das Cruzes.

Membro Titular do Conselho da Sociedade Brasileira de Física (até julho de 2004)

## **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  
Maria Cristina dos Santos  
Marília Junqueira Caldas  
Sylvio Roberto Accioly Canuto

**Pós-Doutores:**

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  
Ronaldo Giro - 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  
Liliana Yolanda Ancalla Dávila - Fonte financiadora: FAPESP  
Marcelo Alves dos Santos - 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

**Mestrandos:**

Alexandre Martins Mélo - Fonte financiadora: sem bolsa  
Benedito Maurício da Silva - Fonte financiadora: sem bolsa  
Edwin Hobi Jr. - Fonte financiadora: FAPESP  
Ferenc Diniz Kiss - Fonte financiadora: CAPES  
Marcelo Maia Garcia - Fonte financiadora: sem bolsa  
Marco Aurélio Poles de Souza - Fonte financiadora: sem bolsa  
Sandro Inácio de Souza - Fonte financiadora: CNPq

**Iniciação Científica:**

Carlos Felipe Alves dos Santos - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC  
Marco Aurélio Poles de Souza - Fonte financiadora: sem bolsa  
Mariana Rossi Carvalho - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC  
Rafael Dias de Menezes - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC  
Reynaldo Matos Hortensi - Fonte Financiadora: CNPq  
Rodrigo Ramos da Silva - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC  
Ronaldo Alves Batista - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC

**Colaboradores Permanentes:**

João Francisco Justo Filho (Departamento de Engenharia de Sistemas Eletrônicos - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo)

Sonia Frota-Pessôa

Wanda Valle Marcondes Machado

**Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:**

Alex Antonelli (Instituto de Física da Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, São Paulo) - visitas curtas

Benedito José Costa Cabral (Universidade de Lisboa, Portugal). Período: 20.12.2004 a 20.01.2005.

Cássio Stein Moura (Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS). Período: 09 a 15.02.2004.

Douglas Soares Galvão (Instituto de Física da Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, São Paulo). Data: 19.08.2004.

Edison Zacarias da Silva (Instituto de Física da Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, São Paulo) - visitas curtas.

Gustavo Martini Dalpian (National Renewable Energy Laboratory-NREL, EUA). Período: de 25 a 26.11.2004.

Luiz Eduardo Oliveira (Instituto de Física da Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, São Paulo) - visitas curtas.

Marco Antonio de Castro (Universidade Federal de Goiás, GO). Período: 25.01 a 02.02.2004.

Neemias Alves de Lima (Universidade Federal do Vale do São Francisco - UNIVASF, Petrolina, Pernambuco). Data: 16 a 23.12.2004.

Pedro Paulo de Mello Venezuela (Universidade Federal Fluminense, Rio de Janeiro) - visitas curtas.

Prasanta Kumar Mukherjee (Indian Association for the Cultivation of Science, Calcutá, Índia). Período: de 15.07 a 12.10.2004.

Raimundo Rocha dos Santos (Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro) - visitas curtas.

Roberto Hiroki Miwa (Departamento de Física da Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, Minas Gerais) - visitas curtas.

Ronaldo Mota (Departamento de Física da Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, Rio Grande do Sul) - visitas curtas.

Ronei Miotto (Instituto de Física da Universidade de Brasília, Brasília, Distrito Federal) - visitas curtas.

Rosa Di Felice (Centro di Ricerca S3 (nanoStructures and bioSystems at Surfaces) dell'Instituto Nazionale per la Fisica della Materia (INFN), Universidade de Modena, Modena, Itália). Período: 1º.12.2003 a 05.01.2004.

Rosa Di Felice (Centro di Ricerca S3 (nanoStructures and bioSystems at Surfaces) dell' Instituto Nazionale per la Fisica della Materia (INFN), Universidade de Modena, Modena, Itália). Período: 29.12.2004 a 29.01.2005.

Salviano de Araújo Leão (Universidade Federal de Goiás). Período: 02 a 17.02.2004.

Solange Binotto Fagan (Centro Universitário Franciscano, Santa Maria, Rio Grande do Sul) - visitas curtas.

Stefaan Cottenier (Department of Physics and Astronomy, Katholieke Universiteit Leuven, Bélgica). Data: 08.12.2004.

Tomé Mauro Schmidt (Departamento de Física da Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, Minas Gerais) - visitas curtas.

#### **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

##### **Doutorandos:**

Alessandro de Souza Carneiro - Fonte financiadora: FAPESP

José Antônio de Souza - Fonte financiadora: FAPESP

Zulmara Virgínia Carvalho - Fonte financiadora: FAPESP

##### **Mestrandas:**

Solange de Andrade - Fonte financiadora: FAPESP (a partir de agosto de 2004)

Sueli Hatsumi Masunaga - Fonte financiadora: FAPESP

##### **Iniciação Científica:**

Solange de Andrade - Fonte financiadora: FAPESP

#### **Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:**

Pedro Demetrio Muñe Bandera (Faculdade de Ciências Naturais, Universidade de Oriente, Santiago de Cuba, Cuba). Período: de 10.04 a 10.07.2004.

#### **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: CNPq

**Doutorandos:**

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

**Mestrando:**

Sérgio Turano de Souza - Fonte financiadora: CNPq

**Colaborador Permanente:**

Valmir Antônio Chitta

**Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:**

Arlette de Waard (Kammerlingh Onnes Laboratorium, Zurick, Amsterdam, Holanda).  
Período: de 27.01 a 06.02.2004.

Duncan Maude (CNRS, França). Período: 1º.02 a 13.02.2004.

Michael Tobar (University of Western Australia, Perth, Australia). Período: de 08 a 15.08.2004.

Yaacov Shapira (Tufts University, Boston, Estados Unidos). Períodos: de 26.12.2003 a 10.01.2004 e de 25.07. a 07.08.2004).

**Pessoal Técnico:**

Carlos Alberto Barioni  
Eronides Alves de Almeida  
Fábio Henrique Grossi  
Flavio do Carmo Fontenelle  
José Alexandre dos Santos  
José Teodosio da Silva (aposentado a partir de 1º.10.2004)  
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

**Pós-Doutores:**

Ana Lúcia Brandl - Fonte financiadora: FAPESP

Enio Lima Jr. Fonte financiadora: convênio entre o IFUSP e o Institut für Neue Materialien - Saabrücken - Alemanha  
Luiz Guilherme Costa Melo - Fonte financiadora: FAPESP

**Doutorandos:**

Alessandro Martins - Fonte financiadora: FAPESP  
Angela Dayana Barra Barrera - Fonte financiadora: FAPESP  
Jeroen Schoenmaker - Fonte financiadora: FAPESP  
Mariana Pojar - Fonte financiadora: CNPq  
Narcizo Marques de Souza Neto - Fonte financiadora: CNPq  
Rafael Alejandro Cajacuri Merino - Fonte financiadora: FAPESP  
Regina Keiko Murakami - Fonte financiadora: FAPESP

**Mestrandos:**

Fábio de Oliveira Jorge - Fonte financiadora: sem bolsa  
Thiago Barros Martins - Fonte financiadora: CNPq

**Iniciação Científica:**

Amanda Defendi Arelaro - Fonte financiadora: FAPESP

**Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:**

Christian Cavelius (Institut fuer Neue Materialien (INM), GmbH, Saarbruecken, Alemanha).  
Período: de de 13.09 a 02.10.2004.

**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:**

Euzi 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 Kühn Teles - Fonte financiadora: FAPESP  
Nilo Maurício Sotomayor Choque - Fonte financiadora: FAPESP  
Sara Cristina Pinto Rodrigues - Fonte financiadora: FAPESP  
Tomás Erikson Lamas - Fonte financiadora: FAPESP

**Doutorandos:**

Adriano Manoel dos Santos - Fonte financiadora: CAPES

Angela Maria Ortiz de Zevallos Marquez - Fonte financiadora: CNPq  
Celso de Araújo Duarte - Fonte financiadora: CNPq  
David Gregorio Pacheco Salazar - Fonte financiadora: FAPESP  
Ivan Ramos Pagnossin - Fonte financiadora: FAPESP  
Marcelo Marques - Fonte financiadora: FAPESP  
Niko Churata Mamani - Fonte financiadora: FAPESP  
Odille Cué Noriega - Fonte financiadora: sem bolsa

**Mestrandos:**

Joelson Cott Garcia - Fonte financiadora: CAPES  
Mauro Fernando Soares Ribeiro Jr. - Fonte financiadora: CNPq  
Sérgio Takimoto Maurício - Fonte financiadora: sem bolsa

**Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:**

Alexander Pawlis (Universidade de Paderborn, Paderborn, Alemanha). Período: de 27.03.2004 a 05.04.2004.

Antônio Tadeu Lino (Departamento de Física da Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, Minas Gerais). Período: de janeiro a dezembro de 2004.

Adilson Sérgio Silveira (Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR) Período: de 02 a 03.02.2004.

Eliermes Arraes Meneses (Instituto de Física da Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, São Paulo). Período: semanalmente, durante todo o ano.

Fernando Cerdeira (Instituto de Física da Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, São Paulo). Período: semanalmente, durante todo o ano.

Friedhelm Bechstedt (Universidade de Jena, Jena, Alemanha). Período: de 21 a 24.03.2004.

Horácio Wagner Leite Alves (Universidade de São João del Rei, São João Del Rei, MG). Período: 22 e 23.04.2004.

Jean-Claude Portal (Grenoble High Magnetic Field Laboratory, CNRS/MPI - LCMI, Grenoble, França). Período: de 21.03.2004 a 03.04.2004.

Luiz Guimarães Ferreira (Instituto de Física da Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, São Paulo) Período: semanalmente de 07.2004 a 12.2004.

Manijeh Razeghi (Northwestern University, Robert R. McCormick School of Engineering and Applied Science - Center for Quantum Devices, Evanston, IL, USA). Período: de 27 a 30.03.2004.

Valder Nogueira Freire (Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, Ceará). Período: 04 a 08.04.2004 e de 17 a 20.10.2004.

**Pessoal Técnico:**

Márcia Ribeiro  
José Geraldo Chagas

**Pessoal Administrativo:**  
Mônica Jimenez Clauzet

#### **4b - Trabalhos em Andamento ou Concluídos em 2004:**

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 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 atômica 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 Engenharia 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  $A_s$ ) 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 radio-fármacos. Em particular, destacamos os seguintes trabalhos para os quais utilizamos os métodos PAW, FP-LAPW ou RS-LMTO-ASA conforme conveniente.

- i) Magnetismo – Comportamento magnético local e propriedades hiperfinas para: impurezas metais de transição em hospedeiros metais de transição e metais nobres, sistemas granulares que apresentam magnorresistência gigante tais como grãos de Co em Ag ou Cu. Este último projeto é desenvolvido em colaboração com a Dra. Renata N. Nogueira (EP-USP) e Dra. Ângela B. Klautau (UFPA).
- ii) Intermetálicos – Análise sistemática de compostos intermetálicos com as estruturas C16 e C11b e impurezas nestas ligas. Este trabalho é desenvolvido

- em colaboração com o Dr. Henrique Saitovich do CBPF no RJ, a Dra. Marta Marszalek de Cracóvia na Polônia e o Dr. Luis Alberto Terrazos Javier na Universidade Federal de Sergipe. Em outra linha estudamos diagramas de fases da liga Fe-Mo-Al, a partir de cálculos de primeiros princípios em colaboração com o Dr. Cláudio G. Schöen do Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da Escola Politécnica da USP, projeto no qual se desenvolveu a tese de doutoramento do aluno Pablo G. G. Ormeño (CNPq).
- iii) Momento de Quadrupolo Elétrico Nuclear – Combinando cálculos precisos de gradiente de campo elétrico no núcleo em moléculas diatômicas (GCE), com medidas de interações quadrupolares, realizadas no Hahn-Meitner, em Berlim, determinamos os momentos de quadrupolo elétrico de núcleos.
  - iv) Moléculas com Aplicações em Medicina – Investigamos propriedades hiperfinas em compostos com possíveis aplicações em medicina (radio-fármacos), em colaboração com pesquisadores experimentais de Leipzig na Alemanha.
  - v) Moléculas em Superfícies Metálicas – Investigamos sistemas com possíveis aplicações em nanotecnologia que são sistemas automontados (SAM), como thiol numa superfície de Au(111), Este projeto envolve o estudante Andrei Reyes Huamantico e é uma colaboração com o Prof. Douglas Soares Galvão (UNICAMP), Rosa Di Felice (Universidade de Modena, Itália) e Profa. Marília Junqueira Caldas (IFUSP).
  - vi) Polímeros Condutores – Realizamos um estudo sistemático de polímeros orgânicos conjugados de interesse para a indústria de dispositivos eletrônicos. Focalizamos algumas famílias especiais de polímeros com interessantes propriedades de transporte ou óticas, buscando compreender os mecanismos de formação do material e as implicações para as propriedades finais, desde o nível de pequenas entidades moleculares (monômeros, oligômeros) na fase gasosa, passando pelo processo de crescimento da cadeia (polimerização), até as condições de empacotamento na fase condensada. Este estudo faz parte do projeto temático (FAPESP) “Mapeamento Teórico Sistemático da Relação Estrutura-Função em Polímeros Conjugados de Interesse Tecnológico”, do projeto “Institutos do Milênio” – PADCT III”. Estes projetos são realizados em colaboração com a Profa. Marília Junqueira Caldas(IFUSP), Prof. Douglas Soares Galvão (UNICAMP) e vários pesquisadores experimentais do Brasil.

### **“Propriedades de Transportes em Pontos Quânticos”**

Watari, K.

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

IxV mostram que é possível identificar os mecanismos de tunelamento que contribuem para a estrutura fina presentes na curva característica.

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); Nicholas, R.J. (Clarendon Lab); Deacon, R.S. (Clarendon Lab.); Hanamoto, L. (CAPES); Faveron, R. (CNPq); Manfrini, M.A. (CNPq); Abramof, E. (INPE); Ueta, A.Y. (INPE) e Oliveira Rappl, P.H. (INPE).

Semicondutores magnéticos e não magnéticos fabricados por técnicas epitaxiais são estudados por meio de suas propriedades ópticas e elétricas. As amostras, fabricadas por MOCVD e MBE, 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 mobilidade 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.

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.

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. e Jardim, R.F.

Esse estudo envolve a produção de grande parte dos materiais que são caracterizados em nosso laboratório. Contando com diversos fornos resistivos de alta temperatura (até 1700° C), o grupo está capacitado para a produção de amostras monocristalinas de óxidos de uma maneira geral. Os crescimentos desses monocristais são feitos pelo

chamado método do fluxo. Paralelamente, o grupo também tem produzido amostras policristalinas de óxidos por diversos métodos alternativos. 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. e Becerra, C.C.

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

#### **“Magnetismo em Sistemas Moleculares”**

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

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

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

Becerra, C.C. e Jardim, R.F.

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  $\text{NiFe}_2\text{O}_4$  e  $\text{CuFe}_2\text{O}_4$  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  $\text{AFe}_2$  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  $\text{AB}_2$  com a estrutura hexagonal C14 (tipo  $\text{MgZn}_2$ ) 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  $\text{AFe}_2$ , 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  $^{57}\text{Fe}$  em função do campo magnético aplicado (até 12 T) nos antiferromagnetos  $\text{TiFe}_2$  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  $\text{HfFe}_2$  e  $\text{NbFe}_2$ . 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  $\text{Zr}(\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x)_2$ .

**“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  $\text{X} = \text{O, S, Se ou Te}$ , por meio de técnicas de moagem mecânica e mecano-síntese, 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  $\text{SiO}_2$ , óxidos  $\text{AB}_2\text{O}_4$ , com estrutura de espinélio e ortoferritas  $\text{YFeO}_3$ . 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., Souza Neto, N.M. 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.

Os filmes são elaborados através da técnica de “magnetron sputtering”, a partir de alvos dos elementos puros. 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 produzirmos 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 são complementadas por medidas de EXAFS realizadas no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS).

#### **“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 LMM, 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 à película. Para a obtenção de uma pequena abertura na fibra óptica, é atacada quimicamente. Assim obtemos um afinamento regular da ponta da fibra. Posteriormente é depositada obliquamente sobre a ponta da fibra, uma camada de Au, 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. O modo magnetoóptico nos permite extrair ciclos de histerese locais na amostra, e imagens de susceptibilidade magnética. Isto demonstra a possibilidade de sensoriar magneticamente a amostra, através do efeito Kerr transversal, mesmo com ondas evanescentes.

### **“Espectroscopia Mössbauer aplicada ao Estudo de Cristalização de Ligas Amorfas”**

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

Estudamos por Espectroscopia Mössbauer, ligas metálicas amorfas de Fe do tipo  $Fe_{78-x}Al_xSi_9B_{13}$  e tivemos como objetivo determinar o papel do alumínio nos processos de cristalização. Investigamos amostras que foram submetidas a processos de moagens distintos e exploramos propriedades magnéticas relacionadas com mudanças de tamanho de grão. Estudos estruturais foram realizados por meio de difração de raios X.

**“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 foi realizado um estudo de magnetismo ambiental, através da caracterização magnética das turfas do médio Vale do Rio Paraíba do Sul. Os principais objetivos foram obter uma correlação paleoclimática e conhecer o comportamento dos minerais magnéticos em turfas.

**“Caracterização de Sedimentos Mainhos da Baixada Santista, Cubatão por Espectroscopia Mössbauer, PIXE e Susceptibilidade Magnética: Um Estudo de Magnetismo Ambiental”**

Jorge, F.O., Partiti, C.S.M., Tabacniks, M.H., Pontuschka, W.M., Mahiques, M.M. (IOUSP), Martins, C.C. (IOUSP) e Figueira, R.C.L. (UCS)

Estamos estudando um conjunto de sedimentos marinhos do rio Casqueiro, Cubatão por Espectroscopia Mössbauer, PIXE e Susceptibilidade Magnética com o objetivo de identificar e estudar as fases do ferro presentes. Este estudo tem, por um lado, um interesse acadêmico que se refere ao estudo da alteração dos postadores de ferro nos sedimentos e por outro um interesse aplicado, pois esses parâmetros poderão ser utilizados na análise e controle de impactos ambientais.

**“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  $Pr_5Fe_{77-x}Cr_xB_{18}$  ( $x=0, 1, 2, 2,5, 3, 4$  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

Coordenador: Guennadii Gusev (a partir de julho de 2004)

#### **“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, fotorefletância, fotoluminescência, de medidas elétricas, etc., estão sendo usadas para estudar as propriedades de GaN e de suas ligas, AlGa<sub>x</sub>N e InGa<sub>x</sub>N, 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, AlGa<sub>x</sub>N/GaN e GaN/InGa<sub>x</sub>N 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  $\mu$  e  $\tau$  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, Applied Physics Letters 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, Applied Physics Letters 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  $\text{InGaN/GaN}$  e  $\text{AlGaIn/GaN}$ , 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, 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  $\mu\text{m}$ . Observamos dois picos de comensurabilidade para cada uma das medidas, a amplitude deles é maior para a amostra com período de 0.5  $\mu\text{m}$ , 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). Temos medido a magnetorresistência de poços quânticos parabólicos de AlGaAs com diferentes larguras ( $W=1000 - 4000 \text{ \AA}$ ) na presença de campo magnético inclinado. 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. 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  $\Delta E_{ij}$ , o qual é muito menor que a energia do ciclotron, porém 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. 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, porem 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). Estudamos QHF em poços parabólicos de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  de tipo n e p com diferentes larguras. 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 04 de outubro de 2000 a 04 de outubro de 2005

**André Bohomoletz Henriques**

Título: “Recursos de Informática”

Fonte: PRÓ-REITORIA DE PESQUISA-USP

Montante: R\$ 3.500,00

Período da Vigência: 2004

**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: “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**

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

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

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

Processo: 490073/03-4

R\$16.200,00

Período de Vigência: de 2003 a 2005

**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 2004.

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

Título: Filmes Epitaxiais Ferromagnéticos de GaN para aplicações em spintrônica”

Fonte: CAPES - DAAD/Probal

Montante: R\$24.134,50 (para 2004)

Período da Vigência: de 2004 a 2005

**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\$ 3.000,00

Período da Vigência: 2004

**Marília Junqueira Caldas**

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

Fonte: TEMÁTICO 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 de dezembro de 2001 a 26 de dezembro de 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 fevereiro de 2006

Título: “Estudo do efeito Hall Quântico em Semicondutores Magnéticos diluídos IV-VI”

Fonte: CNPq/CNRS

Montante: R\$ 16.200,00

Período de Vigência: 2003 a 2005

**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

Título: Auxílio Viagem ao Exterior

Fonte: PRÓ-REITORIA DE PESQUISA-USP

Montante: R\$ 3.000,00

Período da Vigência: 2004

Auxílio Reparo de Equipamento

Fonte: FAPESP

Processo nº: 04/01473-0

Montante: R\$ 14.587,00

Período da Vigência: de abril a junho de 2004

Auxílio Professor Visitante - Prof. Pedro Mune

Fonte: FAPESP

Processo nº: 04/00798-3

Montante: R\$ 17.060,46

Período da Vigência: de abril a julho de 2004

**Sylvio Roberto Accioly Canuto**

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

Fonte: TEMÁTICO 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**

Visita de colaboração científica  
Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, Ceará.  
Período do afastamento: de 10 a 14 de janeiro de 2004.

Visita de colaboração científica.  
Grupo do Prof. Roberto Hiroki Miwa, Faculdade de Física da Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG.  
Período do afastamento: de 26 a 31 de maio de 2004.

Visita de colaboração científica.  
Grupo do Prof. Dr. Luiz Eduardo Oliveira, Instituto de Física 'Gleb Wataghin' da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, São Paulo.  
Período do afastamento: de 02 a 03 de setembro de 2004.

Visita de colaboração científica.  
Grupo do Prof. Dr. Emílio Artacho, a Universidade de Cambridge, Cambridge, United Kingdom.  
Período do afastamento: de 10 a 22 de setembro de 2004.

##### **Antônio Domingues dos Santos**

Visita de colaboração científica.  
Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS.  
Campinas, São Paulo.  
Período do afastamento: de 08 a 11 de março de 2004.

Visita de colaboração científica.  
Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS.  
Campinas, São Paulo.  
Período do afastamento: de 19 a 20 de julho de 2004.

Visita de colaboração científica.  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF.  
Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.  
Período do afastamento: de 09 a 13 de agosto de 2004.

Participar do Curso de Técnicas Avançadas de Análise de Dados de XAS.  
Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS.  
Campinas, São Paulo.  
Período do afastamento: de 16 a 17 de setembro de 2004.

Visita de colaboração científica.  
Grupo do Prof. Dr. Yves Souche, Laboratoire Louis Néel - CNRS.  
Grenoble, França.  
Período do afastamento: de 11 de novembro a 08 de dezembro de 2004.

**Armando Corbani Ferraz**

Dar continuidade ao Projeto CAPES/PROCAD, em desenvolvimento com a Pós-Graduação da Faculdade de Física da Universidade Federal de Uberlândia.

Uberlândia, Minas Gerais.

Período do afastamento: de 17 a 19 de novembro de 2004.

Participar de uma reunião sobre a Pós-Graduação Brasileira, no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF.

Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.

Data do afastamento: 10 de dezembro de 2004.

**Gerardo Fabián Goya**

Visita de colaboração científica.

Grupo do Prof. Dr. Sanjay Mathur, INM Leibniz-Institut für Neue Materialien. Saarbrücken, Alemanha.

Período do afastamento: de 19 a 30 de junho de 2004.

Visita de colaboração científica.

Instituto de Física 'Gleb Wataghin' da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, São Paulo.

Data do afastamento: de 20 de outubro de 2004.

Visita de colaboração científica.

Laboratório de Magnetismo em Sólidos - LMS, Universidad de Los Andes.

Mérida, Venezuela.

Período do afastamento: de 03 a 10 de novembro de 2004.

Visita de colaboração científica.

Institute of Rock Magnetism.

Minneapolis, Estados Unidos.

Período do afastamento: de 29 de novembro a 1º de dezembro de 2004.

**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 07 de janeiro a 07 de fevereiro de 2004.

Visita de colaboração científica.

Grupo do Prof. Dr. Clifford R. Bowers, Universidade da Florida.

Gainesville, Florida, EUA.

Período do afastamento: de 11 de julho a 08 de agosto de 2004.

**Helena Maria Petrilli**

Grupo de Nanociências, a convite da Profa. Dra. Rosa Di Felice, Departamento de Física da Universidade de Modena, Modena, Itália.

Período do afastamento: de 16 de outubro a 06 de novembro de 2004.

**Lucy Vitória Credidio Assali**

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 29 de agosto a 18 de setembro de 2005.

**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 13 de janeiro a 17 de fevereiro de 2004.

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 1º a 28 de setembro de 2004.

**Nei Fernandes de Oliveira Jr.**

Visitas de colaboração científica.

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

Período do afastamento: de 18 a 27 de março de 2004.

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: 19 de junho de 2004 a 05 de julho de 2004.

Visitas de colaboração científica.

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

Empresa Cryogenic Limited, Londres, Inglaterra.

Grupo do Prof. Giorgio Frossati, Leiden University Holanda.

Período do afastamento: 04 a 16 de novembro de 2004.

**Renato de Figueiredo Jardim**

Visita de colaboração científica.

Grupo do Prof. Dr. Alex H. Lacerda, National High Magnetic Field Laboratory - NHMFL, Los Alamos, NM, Estados Unidos.

Grupo do Prof. Dr. Milton S. Torikachvili, San Diego State University, Department of Physics, Estados Unidos.

Período do afastamento:: 29 de junho a 16 de julho de 2004.

Visita de colaboração científica.

Grupo do Prof. Stefano Spagna, Director of Engineering, Quantum Design Inc., Estados Unidos.

Grupo do Prof. Dr. Milton S. Torikachvili, an Diego State University, Department of Physics, Estados Unidos.

Período do afastamento:: 05 a 15 de novembro de 2004.

#### **Sylvio Roberto Accioly Canuto**

Visita de colaboração científica.

Grupo de Física Matemática da Universidade de Lisboa, a convite do Prof. Dr. Benedito Costa Cabral.

Lisboa, Portugal.

Período do afastamento: de 02 a 11 de setembro de 2004.

Visita de colaboração científica.

Departamento de Física, Centro de Ciências Exatas e Naturais, Universidade Federal do Pará.

Pará, Belém.

Período do afastamento: de 23 a 26 de setembro de 2004.

### **4e - Participação em Reuniões Científicas Internacionais:**

#### **Adalberto Fazio**

2004 APS March Meeting.

Montreal, Canadá.

Período do afastamento: de 18 a 27 de março de 2004.

International Conference on Superlattices, Nano-structures and Nano-devices - ICSNN-04.

Cancún, México.

Período do afastamento: de 17 a 25 de julho de 2004.

TNT 2004 "Trends in Nanotechnology".

Segovia, Espanha.

Período do afastamento: de 10 a 22 de setembro de 2004.

III Encontro da SBPMat. - Sociedade Brasileira de Materiais.

Foz do Iguaçu, Paraná.

Período do afastamento: de 10 a 14 de outubro de 2004.

#### **André Bohomoletz Henriques**

27<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors



Flagstaff, Estados Unidos.

16<sup>th</sup> International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics, em Thallahassee. Estados Unidos.

Período do afastamento: de 26 de julho a 06 de agosto de 2004.

**Antônio José Roque da Silva**

International Workshop on Advances in Molecular Electronics: From Molecular Materials to Single-Molecule Devices

Dresden, Alemanha.

Período do afastamento: de 21 a 29 de fevereiro de 2004.

**Armando Paduan Filho**

9<sup>th</sup> Joint MMM Intermag Conference.

Anaheim, California, Estados Unidos

Período do afastamento: de 31 de dezembro de 2003 a 11 de janeiro de 2004.

**Gerardo Fabián Goya**

7<sup>th</sup> International Conference on Nanostructured Materials - NANO'2004.

Wiesbaden, Alemanha.

Período do afastamento: de 19 a 30 de junho de 2004.

10<sup>th</sup> International Conference on Magnetic Fluids.

Guarujá, SP.

Data do afastamento: 02 de agosto de 2004.

III Encontro da SBPMat. - Sociedade Brasileira de Materiais.

Foz do Iguaçu, Paraná.

Período do afastamento: de 10 a 14 de outubro de 2004.

49<sup>th</sup> Conference on Magnetism and Magnetic Materials - MMM2004.

Jacksonville, Florida, Estados Unidos.

Período do afastamento: de 29 de novembro a 1º de dezembro de 2004.

**Guennadii Michailovich Gusev**

III Encontro de Nanodispositivos Semicondutores e Materiais Nanoestruturados - NANOSEMIMAT-3.

Salvador, Bahia

Período do afastamento: de 24 a 28 de março de 2004.

27<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors

Flagstaff, Estados Unidos.

16<sup>th</sup> International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics, em Thallahassee. Estados Unidos.

Período do afastamento: de 11 de julho a 08 de agosto de 2004.

**Helena Maria Petrilli**

XIII International Conference on Hyperfine Interactions and XVII International Symposium on Nuclear Quadrupole Interactions.

Bonn, Alemanha.

Período do afastamento: de 21 a 29 de agosto de 2004.

**Hercílio Rodolfo Rechenberg**

10<sup>th</sup> International Conference on Magnetic Fluids.

Guarujá, SP.

Período do afastamento: de 02 a 06 de agosto de 2004.

JEMS'2004 - Joint European Magnetic Symposia.

Dresden, Alemanha.

Período do afastamento: de 04 a 12 de setembro de 2004.

**Lucy Vitória Credídio Assali**

5<sup>th</sup> European Conference on Silicon Carbide and Related Materials - ECSCRM2004.

Bologna, Itália.

15<sup>th</sup> European Conference on Diamond, Diamond-Like Materials, Carbon Nanotubes, Nitrides & Silicon Carbide - Diamond 2004.

Riva del Garda, Itália.

Período do afastamento: de 29 de agosto a 18 de setembro de 2005.

**Luísa Maria Ribeiro Scolfaro**

III Encontro de Nanodispositivos Semicondutores e Materiais Nanoestruturados - NANOSEMIMAT-3.

Salvador, Bahia

Período do afastamento: de 24 a 28 de março de 2004.

International Workshop on Nitride Semiconductors - IWN-2004.

Pittsburgh, Estados Unidos.

Período do afastamento: de 16 a 26 de julho de 2004.

**Marília Junqueira Caldas**

Gordon Research Conference on Defects in Semiconductors, Colby-Sawyer College.

New London, NH, Estados Unidos.

27<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors.

Flagstaff, Estados Unidos.

Período do afastamento: de 17 a 31.07.2005

III Encontro da SBPMat. - Sociedade Brasileira de Materiais.

Foz do Iguaçu, Paraná.

Período do afastamento: de 10 a 14 de outubro de 2004.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Third International Meeting on Photodynamics

Havana, Cuba.

Período do afastamento: de 14 a 22 de fevereiro de 2004.

#### **4f - Participação em Reuniões Científicas Nacionais:**

##### **Adalberto Fazzio**

XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

Poços de Caldas, Minas Gerais.

Período do afastamento: de 04 a 08 de maio de 2004

Primeiro Workshop em Cerâmicas Nanoestruturadas e Interfaces, na Universidade Federal de São Carlos.

São Carlos, São Paulo.

Período do afastamento: de 14 a 15 de junho de 2004

IX Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica.

Salvador, Bahia.

Período do afastamento: de 10 a 14 de julho de 2004

VIII Workshop de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos-USP, São Carlos, São Paulo.

Período do afastamento: de 28 a 29 de setembro de 2004

IX Semana da Física, na Universidade Estadual de Londrina.

Londrina, Paraná.

Período do afastamento: de 07 a 09 de novembro de 2004

III Encontro do Instituto de Nanociências.

Tiradentes, Minas Gerais.

Período do afastamento: de 15 a 17 de novembro de 2004

Workshop 40 Anos de DFT - Teoria do Funcional da Densidade, no Instituto de Física de São Carlos-USP.

São Carlos, São Paulo.

Período do afastamento: de 17 a 18 de dezembro de 2004

##### **Antônio Domingues dos Santos**

XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

Poços de Caldas, Minas Gerais.

Período do afastamento: de 03 a 04 de maio de 2004

Nanomagnetismo: Desafios e Perspectivas, no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas.

Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.

Período do afastamento: de 24 a 25 de junho de 2004

**Antônio José Roque da Silva**

XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

Poços de Caldas, Minas Gerais.

Período do afastamento: de 04 a 08 de maio de 2004

Workshop 40 Anos de DFT - Teoria do Funcional da Densidade, no Instituto de Física de São Carlos-USP.

São Carlos, São Paulo.

Data do afastamento: de a 18 de dezembro de 2004

**Carmen Silvia de Moya Partiti**

XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

Poços de Caldas, Minas Gerais.

Período do afastamento: de 04 a 08 de maio de 2004

**Gerardo Fabián Goya**

XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

Poços de Caldas, Minas Gerais.

Período do afastamento: de 04 a 08 de maio de 2004

**Helena Maria Petrilli**

3º Encontro de Trabalho do Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos - Institutos do Milênio (CNPq), Atibaia, São Paulo.

Período do afastamento: de 05 a 07 de abril de 2004.

**Hercílio Rodolfo Rechenberg**

XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

Poços de Caldas, Minas Gerais.

Período do afastamento: de 04 a 09 de maio de 2004

**Lucy Vitória Credidio Assali**

XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

Poços de Caldas, Minas Gerais.

Período do afastamento: de 04 a 08 de maio de 2004

Workshop 40 Anos de DFT - Teoria do Funcional da Densidade, no Instituto de Física de São Carlos-USP.

São Carlos, São Paulo.

Data do afastamento: de a 18 de dezembro de 2004

**Marília Junqueira Caldas**

3º Encontro de Trabalho do Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos - Institutos do Milênio (CNPq), Atibaia, SP.

Período do afastamento: de 04 a 07 de abril de 2004.

III Encontro do Instituto de Nanociências.

Tiradentes, Minas Gerais.

Período do afastamento: de 16 a 21 de novembro de 2004

Workshop 40 Anos de DFT - Teoria do Funcional da Densidade, no Instituto de Física de São Carlos-USP.

São Carlos, São Paulo.

Data do afastamento: de a 18 de dezembro de 2004

**Sylvio Roberto Accioly Canuto**

II Escola de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos, Laboratório Nacional de Computação Científica.

Petrópolis, Rio de Janeiro.

Período do afastamento: de 19 a 21 de abril de 2004.

XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

Poços de Caldas, Minas Gerais.

Período do afastamento: de 04 a 06 de maio de 2004

II Workshop em Física Molecular e Espectroscopia.

Niterói, Rio de Janeiro.

Período do afastamento: de 02 a 04 de dezembro de 2004

Workshop 40 Anos de DFT - Teoria do Funcional da Densidade, no Instituto de Física de São Carlos-USP.

São Carlos, São Paulo.

Data do afastamento: de a 18 de dezembro de 2004

**4g - Prêmios e Outras Distinções:**

MENÇÃO HONORÍFICA

Prêmio SBF de Melhor Tese de Doutorado 2004

Dr. Gustavo Martini Dalpian

Orientador: Prof. Dr. Adalberto Fazzio

MENÇÃO HONROSA - 12<sup>o</sup> SIICUSP - Simpósio Internacional de Iniciação Científica

Amanda Defendi Arelaro

Orientador: Prof. Dr. Gerardo Fábian Goya

## **5 - PRODUÇÃO CIENTÍFICA**

### **5a - Trabalhos Apresentados em Eventos Internacionais:**

1. ANJOS, V.; BELL, M.J.V.; LEÃO, S.A.; SOUZA, M.A.R.; LEITE, J.R. and SCHÜLLER, C. - “Elementary Excitations in Resonant Raman Scattering of Modulation-doped Quantum-Wells”. In: *27<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS27*, Flagstaff, AZ, Estados Unidos, de 26 a 30 de julho de 2004.
2. ANTONELLI, A.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - “A Possible Route to Grow Substitutional TM in Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> Alloys”. In: *2004 APS March Meeting*, Montreal, Canadá, de 22 a 26 de março de 2004.
3. ASSALI, L.V.C.; LARICO, R.; MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F. - “Nickel-Vacancy Complexes in Diamond: an *Ab Initio* Investigation”. In: *5<sup>th</sup> European Conference on Silicon Carbide and Related Materials (ECSCRM2004)*, Bologna, Itália, de 06 a 12 de setembro de 2004.
4. ASSALI, L.V.C.; MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F. - “Manganese Impurity in Boron Nitride and Gallium Nitride”. In: *5<sup>th</sup> European Conference on Silicon Carbide and Related Materials (ECSCRM2004)*, Bologna, Itália, de 06 a 12 de setembro de 2004.
5. BUSSI, G.; RUINI, A.; MOLINARI, E. and CALDAS, M.J. - “Light-Emitting Polymers: *Ab Initio* Analysis of Singlet-Exciton Harvesting in PPV”. In: *27<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS27*, Flagstaff, AZ, Estados Unidos, de 26 a 30 de julho de 2004.
6. BRANDL, A.L., ARELARO, A.D., LIMA JÚNIOR, E., GOYA, G.F. – “Interparticle Interactions and Surface Contribution to the Effective Anisotropy in Biocompatible Iron Oxide Nanoparticles used for Contrast”. In: *49<sup>th</sup> Conference on Magnetism and Magnetic Materials*, Jacksonville, Estados Unidos, de 07 a 11 de novembro de 2004.
7. CAETANO, E.; PINHEIRO, J.; FLORES, M.; BEZERRA, G.; FREIRE, V.N.; FARIAS, G.; FERNANDEZ, R.; LEITE, J.R.; OLIVEIRA, M.C. de; PINHEIRO, J.A.; CAVADA, B.; LIMA FILHO, J.L. de and ALVES, H.W.L. - “Molecular Signature in Glycine, L-alanine, and L-asparagine Crystals: Luminescence, *Ab Initio* Calculations, and Clues for Bio-Organic/Semiconductor Applications”. In: *27<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS27*, Flagstaff, AZ, Estados Unidos, de 26 a 30 de julho de 2004.
8. CUCINOTTA, C.; RUINI, A.; MOLINARI, E. and CALDAS, M.J. - “Saturated Carboxylic Acids on Silicon: A First-principles Study”. In: *27<sup>th</sup>*

- International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS27*, Flagstaff, AZ, Estados Unidos, de 26 a 30 de julho de 2004.
9. CUNHA LIMA, I.C. da; RODRIGUES, S.C.P.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R. and SIPAHI, G.M. - "Controlling the Charge and the Spin-Polarization Distribution in (In, Ga, Mn) As-Based diluted Magnetic Semiconductor Multilayered Structures". In: *3<sup>rd</sup> International Conference on Physics and Applications of Spin-Related Phenomena in Semiconductors - PASPS III*, Santa Bárbara, CA, Estados Unidos, de 21 a 23 julho de 2004.
  10. CUNHA LIMA, I.C. da; RODRIGUES, S.C.P.; SIPAHI, G.M.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Valence Band Structure of InGaAs/InGaMnAs Magnetic Multilayers". In: *3<sup>rd</sup> Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures Materials - NANOSEMIMAT-3*, Salvador, Bahia, de 24 a 27 de março de 2004.
  11. CUNHA LIMA, I.C. da; GUSEV, G.M. and LEITE, J.R. - "Spin Polarization by Tilted Magnetic Field in Wide Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As Parabolic Quantum Wells" In: *3<sup>rd</sup> International Conference on Physics and Applications of Spin-Related Phenomena in Semiconductors -PASPS III*, Santa Bárbara, CA, Estados Unidos, de 21 a 23 julho de 2004.
  12. DÁVILA, L.Y.A.; GARCIA, M.M. and CALDAS, M.J. - "Transport Parameters in Oligo-Aniline Crystals" In: *III Brazil-Materials Research Society Meeting*, Foz do Iguaçu, Paraná, de 10 a 13 de outubro de 2004.
  13. FAGAN, S.B.; MOTA, R.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Theoretical Investigation of Iron Dimers and Trimers Interacting with Carbon Nanotubes". In: *III Brazil-Materials Research Society Meeting*, Foz do Iguaçu, Paraná, de 10 a 13 de outubro de 2004.
  14. FAZZIO, A. - "Carbon Nanotube Adsorbed on Hydrogenated Si(001) Surfaces" – *Invited*. In: *III Brazil-Materials Research Society Meeting*, Foz do Iguaçu, Paraná, de 10 a 13 de outubro de 2004.
  15. FAZZIO, A. - "Metal-Semiconducting Behavior of Carbon Nanotubes Adsorbed on Si(100)". In: TNT 2004 "*Trends in Nanotechnology*", Segovia, Espanha, de 13 a 17 de setembro de 2004.
  16. FERREIRA, L.G.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Order-Disorder Transition in Nitride Nanostructures". In: *3<sup>rd</sup> Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures Materials - NANOSEMIMAT-3*, Salvador, Bahia, de 24 a 27 de março de 2004.
  17. GARCIA, J.C.; LINO, A.T.; SCOLFARO, L.M.R.; FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A. and SILVA JR., E.F. da - "Full-Relativistic and Spin Orbit Effects on the SrTiO<sub>3</sub> Band Structure and the Optical Properties in its Tetragonal

- Phase”. In: *III Brazil-Materials Research Society Meeting*, Foz do Iguaçu, Paraná, de 10 a 13 de outubro de 2004.
18. GARCIA, J.C.; LINO, A.T.; SCOLFARO, L.M.R.; FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A.; e DA SILVA JR., E.F. - "Full-relativistic calculation of the optical properties and the carrier effective masses of monoclinic, tetragonal, and cubic ZrO<sub>2</sub>. In: *III Brazil-Materials Research Society Meeting*, Foz do Iguaçu, Paraná, de 10 a 13 de outubro de 2004.
  19. GARCIA, J.C.; LINO, A.T.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A. and SILVA JR, E.F.da - "First Principles Studies of Relativistic and Spin-Orbit Effects on the HFO<sub>2</sub> Band Structures”. In: *3<sup>rd</sup> Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures Materials - NANOSEMIMAT-3*, Salvador, Bahia, de 24 a 27 de março de 2004.
  20. GARCIA, J.C.; SCOLFARO, L.M.R.; FREIRE, V.N.; LEITE, J.R.; LINO, A.T.; FARIAS, G.A. and SILVA JR, E.F. da - "Electronic and Optical Properties of HFO<sub>2</sub>”. In: *3<sup>rd</sup> Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures Materials - NANOSEMIMAT-3*, Salvador, Bahia, de 24 a 27 de março de 2004.
  21. GARCIA, J.C.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; LINO, A.T.; FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A. and SILVA JR., E.F. da - "Band Structure derived Properties of HFO<sub>2</sub> from First Principles Calculations”. In: *27<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS27*, Flagstaff, AZ, Estados Unidos, de 26 a 30 de julho de 2004.
  22. GIRO, R.; DÁVILA, L.Y.A.; PAREDES, A.M.M.; CALDAS, M.J. and ACKCELROD, L. - "New Optoelectronic Multiblock Copolymer: Experimental and Theoretical Study” In: *III Brazil-Materials Research Society Meeting*, Foz do Iguaçu, Paraná, de 10 a 13 de outubro de 2004.
  23. GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E. and LEITE, J.R. - "Anomalous Hall Effect in a Wide Parabolic Well”. In: *3<sup>rd</sup> Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures Materials - NANOSEMIMAT-3*, Salvador, Bahia, de 24 a 27 de março de 2004.
  24. 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: *27<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS27*, Flagstaff, AZ, Estados Unidos, de 26 a 30 de julho de 2004.
  25. GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; LEITE, J.R. and PORTAL, J.C. - "Transport of the Quasi-Three-Dimensional Hole System in a Strong Magnetic field” In: *16<sup>th</sup> International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics - SemiMag-16*, Tallahassee, Estados Unidos, de 02 a 06 agosto de 2004.



26. GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; LEITE, J.R.; BAKAROV, A.K. and TOROPOV, A.I. - "Anomalous Hall effect in a wide parabolic well". In.: *16<sup>th</sup> International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics - SemiMag-16*, Tallahassee, Estados Unidos, de 02 a 06 agosto de 2004.
27. GUSEV, G.M.; SERGIO, C.S.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; LEITE, J.R., and PORTAL, J.C. - "Magnetotransport Anomalies in Hole System in a Wide Parabolic Well". In.: *16<sup>th</sup> International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics - SemiMag-16*, Tallahassee, Estados Unidos, de 02 a 06 agosto de 2004.
28. GUSEV, G.M.; SOTOMAYOR, N.M.; SEABRA, A.C.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E. and LEITE, J.R. - "Resonant Scattering of a Two-Dimensional Electron Gas by Quantum Dot Levels". In: *27<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS27*, Flagstaff, AZ, Estados Unidos, de 26 a 30 de julho de 2004.
29. HENRIQUES, A. B.; DEACON, R.S.; NICHOLAS, R.J. and MASON, N.J. - "High Field "Magnetoresistance of Strongly Coupled Superlattices". In: *27<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS27*, Flagstaff, AZ, Estados Unidos, de 26 a30 de julho de 2004.
30. HENRIQUES, A.B. ; HANAMOTO, L.K.; TER HAAR, E.; ABRAMOF, E.; UETA, A.Y. and OLIVEIRA RAPPL, P.H. de - "Tuning of the Magnetic Field induced Sharp Band-Edge Optical Absortion in Europium Chalcogenides". In.: *16<sup>th</sup> International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics - SemiMag-16*, Tallahassee, Estados Unidos, de 02 a 06 agosto de 2004.
31. HENRIQUES, A.B.; HANAMOTO, L.K; ABRAMOF, E.; UETA, A.Y.; OLIVEIRA RAPPL, P.H. de and OLIVEIRA Jr., N.F - "Magnetic Field induced Polarized Optical Absorption in Europium Chalcogenides". In: *27<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS27*, Flagstaff, AZ, Estados Unidos, de 26 a30 de julho de 2004.
32. HENRIQUES, A.B.; OLIVEIRA, R.F.; LAMAS, T.E. and QUIVY, A.A - "Van Hove Singularities detected by Photoluminescence in doped AlGaAs/GaAs Superlattices". In: *27<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS27*, Flagstaff, AZ, Estados Unidos, de 26 a30 de julho de 2004.
33. HENRIQUES NETO, J.M.; CAETANO, E.W.S.; DA COSTA, J.A.P.; ALBUQUERQUE, L.; FREIRE, V.N.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Éxciton Confinement in Si/TiO<sub>2</sub> 0-2 D Systems" .In: *27<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS27*, Flagstaff, AZ, Estados Unidos, de 26 a30 de julho de 2004.

34. JUSTO, J.F.; SILVA, C.R.S. da; PEREYRA, I. and ASSALI, L.V.C. - “Structural and Electronic Properties of  $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x\text{O}_2$ ”. In: *5<sup>th</sup> European Conference on Silicon Carbide and Related Materials (ECSCRM2004)*, Bologna, Itália, de 06 a 12 de setembro de 2004.
35. LARICO, R.; MACHADO, W.V.M.; ASSALI, L.V.C. and JUSTO, J.F. -“A Theoretical Microscopic Model for the Nickel-Related Defect Centers in Diamond”. In: *15<sup>th</sup> European Conference on Diamond, Diamond-Like Materials, Carbon Nanotubes, Nitrides & Silicon Carbide*, Riva del Garda, Trentino, Itália, de 12 a 17 de setembro de 2004.
36. LIMA Jr., E.; MARTINS FILHO, W.L.; SIVAKOV, V.; GOYA, G.F.; SHEN, H. and MATHUR, S. - “Magnetotransport Properties of Magnetite Thin Films”. In: *III Brazil-Materials Research Society Meeting*, Foz do Iguaçu, Paraná, de 10 a 13 de outubro de 2004.
37. LIMA Jr.; E.; BERQUÓ, T.S., MARTINS FILHO, W.L.; GOYA, G.F., SIVAKOV, V, SHEN and H., MATHUR, S. - “Epitaxial and Polycrystalline  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  Thin Films: Magnetic and Transport Properties”. In: *7<sup>th</sup> International Conference on Nanostructured Materials - NANO2004*, Wiesbaden, Alenhanha, de 20 a 24 de junho de 2004.
38. MACHADO, W.V.M.; JUSTO, J.F. and ASSALI, L.V.C.-“3d-Transition Metals in Cubic and Hexagonal Silicon Carbide”. In: *5<sup>th</sup> European Conference on Silicon Carbide and Related Materials (ECSCRM2004)*, Bologna, Itália, de 06 a 12 de setembro de 2004.
39. MARQUES, A.M.O.Z.; TABATA, A.; SEABRA, A.C.; LEITE, J.R. and FREITAS JR., J. - “Influence of Reactive Ion Etching and Post Growth Thermal Treatments on the Structural and Optical Properties of GaN Light Emission Diode”. In: *27<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS27*, Flagstaff, AZ, Estados Unidos, de 26 a 30 de julho de 2004.
40. MARQUES, M.; FERREIRA, L.G.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. -“Role of the Anion in the Thermodynamic Behavior of Quaternary (Al, Ga, In)X (X=N, P, As) alloys”. In: *3<sup>rd</sup> Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures Materials - NANOSEMIMAT-3*, Salvador, Bahia, de 24 a 27 de março de 2004.
41. MARQUES, M.; FERREIRA, L.G.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - “Indium-Separated phases in AlGaInN Alloys: An Ab Initio Study”. In: *“3<sup>rd</sup> Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures Materials” - NANOSEMIMAT-3*, Salvador, Bahia, de 24 a 27 de março de 2004.
42. MARQUES, M.; FURTHMÜLLER, J.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; BECHSTEDT, F and LEITE, J.R. - “Magnetic Trends in Strained Wurtzite

- and Zinc Blend MnN”. In: *3<sup>rd</sup> Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures Materials - NANOSEMIMAT-3*, Salvador, Bahia, de 24 a 27 de março de 2004.
43. MARQUES, M.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R. and FERREIRA, L.G. - “Ab Initio Studies of Indium Separated Phases in AlGaInN Quaternary Alloys. In: *International Workshop on Nitride Semiconductors - IWN 2004*, Pittsburgh, Estados Unidos; de 18 a 23 de julho de 2004.
44. MARQUES, M.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R. and FERREIRA, L.G. - “Phase Stability and the Role of the Anion in the Quaternary (Al, Ga, In)X (X=N, P, As) Alloys”. In: *27<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS27*, Flagstaff, AZ, Estados Unidos, de 26 a 30 de julho de 2004.
45. MIOTTO, R. and FERRAZ, A.C. - “Glycine Interaction with Silicon(001)”. In: *16<sup>th</sup> International Vacuum Congress/12<sup>th</sup> International Conference on Solid Surfaces*, Veneza, Itália, de 28 de junho a 02 de julho de 2004.
46. MIOTTO, R.; SOLER, M.A.G.; CUNHA, J.F.R.; SILVA, S.W.; MORAIS, P.C.; TADA, D.B.; PETRI, D.F.S.; BAPTISTA, M.S. and FERRAZ, A.C. - “Thionin Adsorption on Silicon(001): Structural Analysis”. In: *16<sup>th</sup> International Vacuum Congress/12<sup>th</sup> International Conference on Solid Surfaces*, Veneza, Itália, de 28 de junho a 02 de julho de 2004.
47. MIWA, R.H.; ORELLANA, W. and FAZZIO, A. - “Metal-Semiconducting Behavior of Carbon Nanotubes Adsorbed on Hydrogenated Si(001) Surfaces” *Invited*. In: *III Brazil-Materials Research Society Meeting*, Foz do Iguaçu, Paraná, de 10 a 13 de outubro de 2004.
48. OLIVEIRA, L.E.; SANTOS, R.R. dos; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - “Ab Initio Calculations of Mn-Mn Interactions in Ga<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>As Semiconductors”. In: *2004 APS March Meeting*, Montreal, Canadá, 22 a 26 de março de 2004.
49. OLIVEIRA, R.F.; HENRIQUES A.B.; LAMAS, T.E.; QUIVY, A.A. and ABRAMOF, E.; “Optical Measurement of Miniband Dispersion and Bandgap Renormalization in Modulation-Doped AlGaAs/GaAs Superlattices”. In: *16<sup>th</sup> International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics - SemiMag-16*, Tallahassee, Estados Unidos, de 02 a 06 agosto de 2004.
50. ORELLANA, W.; FAZZIO, A. and MIWA, R.H. - “Metal-Semiconductor Behavior of Armchair Carbon Nanotubes Adsorbed on Partially-Hydrogenated Si(001) Surfaces”. In: *International Conference on Superlattices, Nano-Structures and Nano-Devices - ICSNN04*, Cancún, México, 19 a 23 de julho de 2004.

51. PADUAN Filho, A.; GRATENS, X. and OLIVEIRA Jr., N.F. - "High-Field Magnetization in the Quantum Spin Magnet  $\text{NiCl}_2\text{S}(\text{NH}_2)_2$ ". In: 9<sup>th</sup> Joint Magnetism and Magnetic Materials - Intermag Conference 2004, Anaheim, CA, Estados Unidos, de 04 a 08 de janeiro de 2004.
52. PEREIRA, T.A.S.; FREIRE, J.A.K.; SOUSA, J.A.S.; FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R. and SILVA JR., E.F. da - "Remarkably Image Potential Effects in  $\text{SrTiO}_3/\text{Si}$  and  $\text{HfO}_2/\text{Si}$  Tunneling Structures". In: 27<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS27, Flagstaff, AZ, Estados Unidos, de 26 a 30 de julho de 2004.
53. PETRILLI, H.M.; DI FELICE, R.; CORNI, S.; CALDAS, M.J. and MOLINARI, E. - "Hyperfine Interactions in Metalloproteins studied by Ab Initio". In: XIII International Conference on Hyperfine Interactions and XVII International Symposium on Nuclear Quadrupole Interactions, Bonn, Alemanha, de 23 a 27 de agosto de 2004.
54. QUIVY, A.A.; SILVA, M.J. da; LAMAS, T.E.; SILVA, E.C.F. da and LEITE, J.R. - "Large Self-Assembled InAs/GaAs Quantum Dots with Optical Emission above 1.3  $\mu\text{m}$ ". In: 3<sup>rd</sup> Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures Materials - NANOSEMIMAT-3, Salvador, Bahia, de 24 a 27 de março de 2004.
55. RECHENBERG, H.R. - "Enhanced Surface Anisotropy in Nickel Ferrite Nanoparticles". In: 10<sup>th</sup> International Conference on Magnetic Fluids, Guarujá, São Paulo, de 02 a 06 de agosto de 2004.
56. RECHENBERG, H.R. - "Magnetic Properties of Laves Phase  $\text{Hf}(\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x)_2$ ". In: Joint European Magnetic Symposia - JEMS'2004, Dresden, Alemanha, de 05 a 10 de setembro de 2004.
57. RODRIGUES, S.C.P.; SIPAHI, G.M; CUNHA LIMA, I.C. da; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Electronic Properties of GaMnAs/GaAs Ferromagnetic Multilayers". In: 3<sup>rd</sup> Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures Materials - NANOSEMIMAT-3, Salvador, Bahia, de 24 a 27 de março de 2004.
58. SANTOS, M.A.; DÁVILA, LY.A.; CAPAZ, R. B.; PETRILLI, H.M.; and CALDAS, M.J. - "Study of Geometric Properties of Phenylene Systems Through Different Ab Initio Methods". In: CECAM Workshop "The Nature of Hydrogen Bonding and Density Functional Theory", Lyon, França, de 02 a 05 de junho de 2004.
59. SANTOS, M.A.; DÁVILA, LY.A.; CAPAZ, R. B.; PETRILLI, H.M.; and CALDAS, M.J. - "Study of Geometric Properties of Phenylene Systems Through Different Ab Initio Methods". In: III Brazil-Materials Research Society Meeting, Foz do Iguaçu, Paraná, de 10 a 13 de outubro de 2004.

60. SILVA, A.J.R. da; FAZZIO, A.; ANTONELLI, A.; OLIVEIRA, L.E. and DOS SANTOS, R.R. - "Theoretical Studies of Mn in GaAs and Type-IV Semiconductors". In: *III Brazil-Materials Research Society Meeting*, Foz do Iguaçu, Paraná, de 10 a 13 de outubro de 2004.
61. SILVA, A.J.R. da; PONTES, R.B. and FAZZIO, A. - "A Study of Electronic and Structural Properties of the [Co(tpy-SH)<sub>2</sub>]" In: *2004 APS March Meeting*, Montreal, Canadá, de 22 a 26 de março de 2004.
62. SILVA, C.R.S. da; JUSTO, J.F.; PEREYRA, I. and ASSALI, L.V.C. - "A First Principles Investigation on Hypothetical Crystalline Phases of Silicon Oxycarbide". In: *15<sup>th</sup> European Conference on Diamond, Diamond-Like Materials, Carbon Nanotubes, Nitrides & Silicon Carbide*, Riva del Garda, Trentino, Itália, de 12 a 17 de setembro de 2004.
63. SILVA, E.Z. da; NOVAES, F.D.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Effect of Impurities in Gold Nanowires". In: *2004 APS March Meeting*, Montreal, Canadá, de 22 a 26 de março de 2004.
64. SILVA, M.J. da; QUIVY, A.A.; MARTINI, S.; LAMAS, T.E.; SILVA; E.C.F. da and LEITE, J.R. - "Large InAs/GaAs Quantum Dots with an Optical Response in the Long-Wavelength Region". In: *2004 International Conference on Molecular Beam Epitaxy*, Edinburgh, Escócia, de 22 a 27 de agosto de 2004.
65. SIPAHI, G.M.; RODRIGUES, S.C.P.; CUNHA LIMA, I.C. da; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Luminescence Spectra in Metallic and Ferromagnetic GaMnAs/GaAs Multilayers: A Self-Consistent Super-Cell Luttinger-Kohn k.p. Calculation". In: *3<sup>rd</sup> Workshop on Semiconductor Nanodevices and Nanostructures Materials - NANOSEMIMAT-3*, Salvador, Bahia, de 24 a 27 de março de 2004.
66. SIPAHI, G.M.; RODRIGUES, S.C.P.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R. and CUNHA LIMA, I.C. da - "Spin-Polarized Charge Densities in (In, Ga, Mn) As-based Diluted Magnetic Semiconductor Ternary and Quaternary Alloy Heterostructures". In: *27<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS27*, Flagstaff, AZ, Estados Unidos, de 26 a 30 de julho de 2004.
67. SIPAHI, G.M.; RODRIGUES, S.C.P.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R. and CUNHA LIMA, I.C. da ; "Spin-Polarized k.p. Theory Applied to DMS Devices". In: *International Conference on Superlattices Nanostructures and Nanodevices*, Cancun, México, de 19 a 23 de julho de 2004.
68. SOTOMAYOR, N.M.; GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; BYKOV, A.A.; BAKAROV, A.K.; KUDRYASHEV, V.M. and TOROPOV, A.I. - Non-Markovian Memory Effects in Ballistic Two-Dimensional Electron System with Non-Planar Topology". In: *27<sup>th</sup> International Conference on the Physics*

*of Semiconductors - ICPS27*, Flagstaff, AZ, Estados Unidos, de 26 a 30 de julho de 2004.

69. TELES, L.K.; FERREIRA, L.G.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Ordered Phases in InGaN and AlGaN Alloys under Strain". In: *International Workshop on Nitride Semiconductors - IWN 2004*, Pittsburgh, Estados Unidos; de 18 a 23 de julho de 2004.

### **5b - Trabalhos Apresentados em Eventos Nacionais:**

1. ALVES, H.W.L.; ALVES, J.L.A.; SANTOS, A.M.; SCOLFARO, L.M.R. e LEITE, J.R. - "Strain effects on the vibrational modes of III-nitrides In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
2. ALVES, H.W.L.; CAETANO, E.W.S.; FLORES, M.Z.S.; PINHEIRO, J.R.; FREIRE, V.N. FARIAS, G.A.; BEZERRA, G.A.; CAVADA, B.S.; FERNANDEZ, J.R.L.; LEITE, J.R.; DE OLIVEIRA, M.C.F.; PINHEIRO, J.A. e LIMA FILHO, J.L. de - "Calculations of the Electronic Structure and Single Excitations of  $\alpha$ -Glycine, L-Alanine, and L-Asparagine In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
3. ANDRADE, S.; JARDIM, R.F. e ESCOTE, M.T. - "Medidas de Resistividade Elétrica sob Pressão  $\rho(T,P)$  em Amostras do Tipo  $Nd_{1-x}Eu_xNiO_3$ ;  $x = 0, 0.25, 0.30$  e  $0.35$ ". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
4. ANJOS, V.; BELL, M.J.V.; GUARNIERI, L.C.; BARONE, P.M.V.B.; DANTAS, S.O. e LEITE, J.R. - "Raman Spectroscopy of n-GaN in cubic phase". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
5. ANJOS, V.; BELL, M.J.V.; LEÃO, S.A.; SOUZA, M.A.R. e LEITE, J.R. - "Elementary excitations of modulation-doped quantum-wells". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
6. ARANTES JR., J.T.; SCHMIDT, T.M. and FAZZIO, A. - "Ab Initio Study of  $90^\circ$  Partial Dislocation in Silicon". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.

7. ASSALI, L.V.C., MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F. - "Transition Metal Impurities in Cubic and Hexagonal Silicon Carbide". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
8. AYRES, F.; MACHADO, W.V.M.; ASSALI, L.V.C. and JUSTO, J.F. - "Propriedades Estruturais e Mecânicas do  $\alpha$ -HgI<sub>2</sub>". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
9. BARRA-BARRERA, A.D.; PÁSSARO, A.M.P.; PARTITI, C.S.M. e VILLAS-BOAS, V. - "Nanocrystalline Magnetic PrFeCrB Alloys". In: *XVI CBECIMAT - Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais*, Porto Alegre, RS, de 28 de novembro a 02 de dezembro de 2004.
10. CARNEIRO, A.S.; FONSECA, F.C.; JARDIM, R.F. e KIMURA, T. - "Magnetization Steps in Cr-doped Nd<sub>0.5</sub>Ca<sub>0.5</sub>MnO<sub>3</sub>". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
11. DÁVILA, L.Y.A. e CALDAS, M.J. - "Estudo Teórico comparativo de Polidifenilamina e Polianilina" In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
12. DÁVILA, L.Y.A., SANTOS, M.A.; PETRILLI, H.M. e CALDAS, M.J. - "Estudo Ab Initio de Poliparafenileno". In: *3º Encontro de Trabalho do Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos*, Nazaré Paulista/Atibaia, São Paulo, de 05 a 07 de abril de 2004.
13. DUARTE, C.A.; CHITTA, V.A.; COAQUIRA, J.A.H.; FERNANDEZ, J.R.L.; LEITE, J.R.; SCHIKORA, D.; AS, D.J. e LISCHKA, K. - "Room temperature ferromagnetism in Mn<sup>+</sup> implanted cubic GaN". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
14. ESCOTE, M.T.; LONGO, E.; JARDIM, R.F. e CAMPO, J. - "Critical Behavior Close to the Metal-Insulator Transition in Nd<sub>1-x</sub>Eu<sub>x</sub>NiO<sub>3</sub> Compounds". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
15. FILETI, E.E. and CANUTO, S. - "Estudo Ab Initio das Propriedades Elétricas e Ópticas de Complexos Envolvendo Álcool e Água". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
16. GARCIA, J.C.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; LINO, A.T.; FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A. e SILVA JR., E.F. da - "Massas efetivas e propriedades

- ópticas do  $\text{HfO}_2$  cúbico e tetragonal”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
17. GARCIA, M.M. e CALDAS, M.J., - “Contutância através de uma Pilha de Guaninas” In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
  18. GOYA, G.F. - “Influence of the Interparticle Interactions on the Ordered State in Ball-Milled  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  Nanoparticles with Controlled Size Influence of the Interparticle Interactions on the Ordered State in Ball-Milled  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  Nanoparticles with Controlled Size Distribution”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
  19. HANAMOTO, L.K.; HENRIQUES, A.B.; ABRAMOF, E.; OLIVEIRA RAPPL, P.H. de e UETA, A.Y. - “Magnetic Field induced Absorption in  $\text{Pb}_x\text{Eu}_{1-x}\text{Te}$ ”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
  20. HENRIQUES NETO, J.M.; DA COSTA, J.A.P.; ALBUQUERQUE, E.L.; CAETANO, E.W.S.; FREIRE, V.N.; SCOLFARO, L.M.R. e LEITE, J.R. - “Cálculos de propriedades excitônicas em nanoestruturas 2D Si/TiO<sub>2</sub>”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
  21. IWAMOTO, W.A.; URBANO, R.R.; RETTORI, C.; PAGLIUSO, P.G.; JARDIM, R.F.; FONSECA, F.C.; TORIKACHVILI, M.S. e OSEROFF, S.B. - “Electron Spin Resonance of  $\text{Gd}^{3+}$  in the Ir-doped Magnetic Superconductor  $\text{RuSr}_2\text{GdCu}_2\text{O}_8$ ”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
  22. JORGE, F.O.; PARTITI, C.S.M.; MAHIQUES, M.M., MARTINS, C.C. e FIGUEIRA, R.C.L. - “Espectroscopia Mössbauer de Sedimentos Marinhos da Baixada Santista, São Paulo: Um Estudo de Magnetismo Ambiental”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
  23. KISS, F.D. e FERRAZ, A.C. - “Adsorção e Dissociação Molecular do Oxigênio na Superfície do  $\text{CdTe}(110)$ ”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
  24. LARICO, R.; MACHADO, W.V.M.; ASSALI, L.V.C. e JUSTO, J.F. - “A Theoretical Microscopic Model for the Nickel-Related Defect Centers in Diamond”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.



25. LEÃO, S.A.; SILVA, E.Z. da; FARIA, J.C.; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - “Adsorption of Noble Metals Atoms on Carbon Nanotubes”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
26. LUDWIG, V.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - “Accurate Classical-Quantum Simulation for the Absorption Spectrum of the Hydrated Electron”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, de 04 a 08 de maio de 2004.
27. LUDWIG, V.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - “Efeitos do Meio Aquoso na Estrutura e na Energia do Complexo Guanina-Citosina”. In: *II Escola de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos*, Petrópolis, Rio de Janeiro, de 19 a 24 de abril de 2004.
28. LUZ, M.S.; SANTOS, C.A.M.; SANDIM, M.J.R.; FERREIRA, B.; MACHADO, A.J.S. e JARDIM, R.F. - “Aplicação do Modelo RSJ em Amostras Supercondutoras Granulares”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
29. MALASPINA, T. e CANUTO, S. - “Estudo das Ligações de Hidrogênio Formadas em Aglomerados de Pirazina e Água nas Fases Gasosa e Líquida”. In: *II Escola de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos*, Petrópolis, Rio de Janeiro, de 19 a 24 de abril de 2004.
30. MALASPINA, T. e CANUTO, S. - “Estudo Teórico Usando Monte Carlo-Mecânica Quântica do Espectro UV-vis da Molécula de Pirazina em Solução Aquosa”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
31. MARQUES, M.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R. e FERREIRA, L.G. - “First principles studies of indium clustering in AlGaInN alloys”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
32. MARQUES, M.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R. e FERREIRA, L.G.; “Microscopic behavior of quaternary (Al,Ga,In)X (X =N, P, As) alloys: the role played by the anion”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
33. MARTINS FILHO, W.L.; LIMA Jr., E.; GOYA, G.F.; SIVAKOV, V.; SHEN, H. e MATHUR, S. - “Magnetic Properties of Magnetite Thin Films grown by Chemical Vapor Deposition on Different Substrates”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.

34. MARTINS FILHO, W.L.; LIMA Jr., E.; GOYA, G.F.; SIVAKOV, V.; SHEN, H. e MATHUR, S. - "Magnetic Properties of Magnetite Thin Films grown by Chemical Vapor Deposition on Different Substrates". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
35. MASUNAGA, S.H. e JARDIM, R.F. - "Competição entre Fases em Manganitas de (La,Pr)CaMnO". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
36. MIWA, R.H.; ORELLANA, W. e FAZZIO, A. - "Metal-Semiconducting Behavior of Metallic Carbon Nanotubes Adsorbed on Hydrogenated Si(001) Surfaces". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
37. OLIVEIRA, R.F.; HENRIQUES A.B.; LAMAS, T.E.; QUIVY, A.A. e ABRAMOF, E. - "Optical Measurement of Miniband Dispersion and Bandgap Renormalization in Modulation-Doped AlGaAs/GaAs Superlattices. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
38. ORELLANA, W.; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - "Diffusion-Reaction Mechanisms of Nitriding Species in SiO<sub>2</sub>". In: *IX Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica*, Salvador, Bahia, de 11 a 16 de julho de 2004.
39. ORMEÑO, P.G.G.; PETRILLI, H.M.; SCHÖN, C.G. e NOGUEIRA, R.N. - "Magnetismo em Ligas Ternárias Fe-Al-Mo". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
40. PAGNOSSIN, I.R.; SILVA, E.C.F. da; QUIVY, A.A.; MARTINI, S.; SERGIO, C.S. e LEITE, J.R. - "The influence of an InAs layer on the quantum mobility of a two-dimensional electron gas in GaAs/InGaAs selectively doped quantum wells". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
41. PEREIRA, T.A.S.; CAETANO, E.W.S.; FREIRE, J.A.K.; FARIAS, G.A.; SCOLFARO, L.M.R. e LEITE, J.R. - "Efeito de carga imagem em poços quânticos". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
42. PONTES, R.B.; FAZZIO, A. e SILVA, A.J.R. da - "Electronic and Structural Properties of [Co(tpy-SH)<sub>2</sub>]"'. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.

43. QUINTÃO, A.D. e CANUTO, S. - “Estudo Estrutural e Espectroscópico de Dioxinas Originadas da Combustão do PVC”. In: *IX Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica*, Salvador, Bahia, de 11 a 16 de julho de 2004.
44. RIVELINO, R. e CANUTO, S. - “Estabilidade Conformacional de Complexos Moleculares de Lactonitrila e Água”. In: *IX Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica*, Salvador, Bahia, de 11 a 16 de julho de 2004.
45. RODRIGUES, B.B.D.; MONTE, A.F.G.; SOLER, M.A.G.; DA SILVA, S.W.; MORAIS, P.C.; QUIVY, A.A.; MARTINI, S. e LEITE, J.R. - “Estudo da difusão de portadores em poços quânticos de InGaAs/GaAs crescidos sobre substratos vicinais de GaAs (001)”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
46. ROSSATO, J.; MOTA, R.; BAIERLE, R.J. e FAZZIO, A. - “Estudo de Vacância Induzida em Nanotubo”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
47. SALAZAR, D.G.P.; LEITE, J.R.; FERNANDEZ, J.R.L.; CERDEIRA, F.; MENESES, E.A.; LI, S. e LISCHKA, K. - “Optical properties of cubic InGaN epilayers grown by MBE”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
48. SANTOS, A.D. e POJAR, M. - “O Aperfeiçoamento do MO-SNOM enquanto um Magnetômetro à Efeito Kerr”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
49. SANTOS, A.D.; BARRA-BARRERA, A.D.; FANTINI, M.C.A. e SAMPAIO, L.C. - “Estudo das Propriedades Magnéticas e Estruturais em Exchange Bias de NiFe/FeMn”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
50. SANTOS, A.D.; CERNICCHIARO, G.; GUIMARÃES, A.P.; SCHOENMAKER, J.; SEABRA, A.C. e SAMPAIO, L.C. - “Desenvolvimento de MicroSQUIDS para o Estudo de Nano-objetos Magnéticos Isolados”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
51. SANTOS, A.D.; MARTINS, A.; FANTINI, M.C.A.; PRADO, R.J.; SOUZANETO, N.M.; RAMOS, A.Y. e TOLENTINO, H. - “Estudo da Estrutura de Ordem Local de Filmes Finos de FePt com o Auxílio da Técnica de XAS”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.

52. SANTOS, A.D.; POJAR, M.; MELO, L.G.C.; SCHOENMAKER, J.; ROMERO, S.A. e SOUCHE, Y. - “MOKE + Plasmons de Superfície = Alta Sensibilidade Magnética”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
53. SANTOS, A.D.; SCHOENMAKER, J.; LANCAROTTE, M.S.; SEABRA, A.C.; SAMPAIO, L.C. e SOUCHE, Y. - “Processamento de Sondas de Varredura para MO-SNOM”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
54. SANTOS, M.A.; PETRILLI, H.M. e CALDAS, M.J. - “Estudo da Interface Polímero-Substrato em Eletrônica Molecular”. In: *3º Encontro de Trabalho do Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos*, Nazaré Paulista/Atibaia, São Paulo, de 05 a 07 de abril de 2004.
55. SANTOS, M.A.; PETRILLI, H.M. e CALDAS, M.J. - “Propriedades Eletrônicas e Estruturais em Compostos Orgânicos”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
56. SILVA, A.J.R. da; FAZZIO, A. e ANTONELLI, A. - “A Possible Route to Grow Substitutional TM in  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  Alloys”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
57. SILVA, A.J.R. da; FAZZIO, A.; SANTOS, R.R. dos e OLIVEIRA, L.E. - “Ab Initio Calculations of Mn-Mn Interactions in  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$  Semiconductors”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
58. SILVA, L.B. da; MOTA, R.; FAZZIO, A.; SILVA, A.J.R. da e FAGAN, S.B. - “Estudo da Adsorção de Silício em Nanotubos de Carbono com Vacâncias”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
59. SILVA, P.B.; AGUIAR, J.A. e JARDIM, R.F. - “Propriedades Estruturais, Microestruturais e Magnéticas de Supercondutores do Tipo  $\text{Ca}_{0,5}\text{LaBa}_{1,5}\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
60. SIPAHI, G.M.; D’EURYDICE, M.N.; RODRIGUES, S.C.P.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R. e CUNHA LIMA, I.C. da - “Optical and electronic properties of diluted magnetic semiconductors”. In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.

61. SOTOMAYOR, N.M.; GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; BYKOV, A.A.; BAKAROV, A.K.; KUDRYASHEV, V.M. e TOROPOV, A.I. - "Linear negative magnetoresistance due to memory effects in two-dimensional electron gas in non-planar topology". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
62. SOUZA, S.I. e FERRAZ, A.C. - "Passivação da Superfície InP(001) através da Adsorção e Dissociação da Molécula de H<sub>2</sub>S". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
63. VENEZUELA, P.; MIWA, R.H. e FAZZIO, A. - "Carbon in Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x</sub>: An Ab Initio Investigation". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.
64. ZANELLA, I.; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - "C<sub>59</sub>Si on the Monohydride Si(100) Surface". In: *IX Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica*, Salvador, Bahia, de 11 a 16 de julho de 2004.
65. ZANELLA, I.; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - "Electronic and Structural Properties of C<sub>59</sub>Si on the Monohydride Si(100) Surface". In: *XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Poços de Caldas, Minas Gerais, de 04 a 08 de maio de 2004.

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

1. AGUIAR, O.D.; OLIVEIRA Jr., N.F.; ANDRADE, L.A.; FROSSATI, G.; BARROSO, J.J. and FRAJUCA, C. - "The Brazilian Spherical Detector: Progress and Plans", *Classical and Quantum Gravity* **21**, 457 (2004).
2. 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 → 2p± Transition Energies in GaN Structures", *Solid State Communications* **130**, 95 (2004).
3. ALVES, C.R.; SOUSA, M.H.; AQUINO, R.; RECHENBERG, H.R.; GOYA, G.F.; TOURINHO, F.A. and DEPEYROT, J. - "Low Temperature Experimental Investigation of Finite-Size and Surface Effects in CuFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> Nanoparticles of Ferrofluid", *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials* **20**, 694 (2004).

4. 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* **34**, 617 (2B) (2004).
5. ANJOS, V.; LEÃO, S.A.; SOUZA, M.A.R. and LEITE, J.R. - "DC Voltage Effect on Elementary Excitations of a Two-Dimensional Electron Gas", *Physical Review B* **70**, 035313 (2004).
6. ANTIC, B.; GOYA, G.F.; KUSIGERSKI, V.; JOVIC, N.; MITRIC, M. and RECHENBERG, H.R. - "Spin-Glass Formation in Li-substituted Co<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> Spinel", *Journal of Physics Condensed Matter* **16**, 651 (2004).
7. ASSALI, L.V.C.; MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F. - "Titanium Impurities in Silicon, Diamond and Silicon Carbide", *Brazilian Journal of Physics* **34** (2B), 602 (2004).
8. 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*. **69**, 155212 (2004).
9. 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* **34** (2B), 681 (2004).
10. 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* **30**, 57 (2004).
11. BERGMAN, A.; HOLMSTRÖM, E.; NIKLASSON, A.M.N.; NORDSTRÖM, L.; FROTA-PESSÔA, S. and ERIKSSON, O. - "Magnetism of Fe Clusters embedded in a Co Matrix from First-Principles Theory", *Physical Review B* **70**, 174446 (2004).
12. BERQUÓ, T.S.; THOMPSON, R. and PARTITI, C.S.M. - "Magnetic Study of Brazilian Peats from São Paulo State", *Geoderma* **118**, 233 (2004).
13. BETANCUR, J.D.; BARRERO, C.A.; GRENECHE, J.M. and GOYA, G.F. - "The Effect of Water Content on the Magnetic and Structural Properties of Goethite", *Journal of Alloys and Compounds* **369**, 247 (2004).
14. BOSELLI, M.A.; CUNHA LIMA, I.C.; LEITE, J.R.; TROPER, A. and GHAZALI, A. - "Ferromagnetism in the Metallic Phase of (Ga, Mn)N Nanostructures", *Applied Physics Letters* **84**, 1138 (2004).
15. BREWER, W. D.; SCHERZ, A.; SORG, C.; WENDE, H.; BABERSCHKE, K. and FROTA-PESSÔA, S. - "Direct Observation of Orbital Magnetism in Cubic Solids", *Physical Review Letters* **93**, 077205 (2004).

16. CASTRO, G.M.B.; RODRIGUES, A.R.; MACHADO, F.L.A.; ARAUJO, A.E.P.; JARDIM, R.F.; NIGAM, A.K. - "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* **369**, 108 (2004).
17. CASTRO, G.M.B.; RODRIGUES, A.R.; MACHADO, F.L.A.; 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* **272**, 1848 (2004).
18. CHITTA, V.A.; COAQUIRA, J.A.H.; FERNADEZ, J.R.L.; DUARTE, C.A.; LEITE, J.R.; SCHIKORA, D.; AS, D.J.; LISCHKA, K. and ABRAMOF, E. - "Room Temperature Ferromagnetism in Cubic GaN Epilayers implanted with  $\text{Mn}^+$  ions", *Applied Physics Letters* **85** (17), 3777 (2004).
19. CORNEJO, D.R.; PADRON-HERNANDEZ, E.; RECHENBERG, H.R.; AZEVEDO, A. and REZENDE, S.M. - "Study of Magnetic Properties in Ball-Milled MnFeCo Composites", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*.**272/6**, 1211 and 1213 (2004).
20. COUTINHO, K.; COSTA CABRAL, B.J. and CANUTO, S. - "Can Larger Dipoles Solvate Less? Solute-Solvent Hydrogen Bond and the Differential Solvation of Phenol and Phenoxy", *Chemical Physics Letters* **399**, 534 (2004).
21. COUTINHO, K.; LUDWIG, V. and CANUTO, S. - "Combined Monte Carlo and Quantum Mechanics Study of the Hydration of the Guanine-Cytosine Base Pair", *Physical Review E* **69**, 61902 (2004).
22. CUCINOTTA, C.; RUINI, A.; CALDAS, M. J. and MOLINARI, E. - "Ab initio Study of chemisorption Reactions for Carboxylic Acids on Hydrogenated Silicon Surfaces", *Journal of Physical Chemistry B* **108**, 17278 (2004).
23. DALPIAN, G.M.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Adsorption of Mn Atoms on the Si(100) Surface", *Surface Science* **688**, 566 (2004).
24. DALPIAN, G.M.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Initial Stages of Ge and Si Growth Near S-B Monoatomic Steps on Si(100)", *Physical Review B* **70**, 193306 (2004).
25. DEACON, R.S.; HENRIQUES, A.B.; NICHOLAS, R.J. and SHIELDS, P. - "High Field Magnetoresistance of Strongly Coupled InAs/GaSb Superlattices", *Aip Conference Proceedings* **772**, 1019 (2004).
26. ESCOTE, M.T.; PONTES, F.M.; LEITE, E.R.; LONGO, E.; JARDIM, R.F. and PIZANI, P S. - "High Oxygen Pressure Annealing Effects on the

- Ferroelectric and Structural Properties of  $\text{PbZr}_{0.3}\text{Ti}_{0.7}\text{O}_3$  Thin Films”, *Journal of Applied Physics* **96**, 2186 (2004).
27. ESTIBALS, O.; KVON, 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* **22**, 446 (2004).
28. FAGAN, S.B.; MOTA, R.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - “An Ab Initio Study of Manganese Atoms and Wires Interacting with Carbon Nanotubes”, *Journal of Physics: Condensed Matter* **16**, 3647 (2004).
29. FAGAN, S.B.; MOTA, R.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - “Substitutional Si Doping in Deformed Carbon Nanotubes”, *Nano Letters* **4**, 975 (2004).
30. FERLAUTO, A.S.; ALVAREZ, F.; FONSECA, F.C.; GOYA, G.F. and JARDIM, R.F. - “Co-sputtered Carbon-Nickel Nanocomposite Thin Films”, *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials*.**20-21**, 700 (2004).
31. FERNANDEZ, J. R. L.; CERDEIRA, F.; MENESES, E. A.; SOARES, J. A. N. T.; NORIEGA, O. C.; LEITE, J. R.; AS, D. J.; KÖHLER, U.; SALAZAR, D. G. P.; SCHIKORA, D. and LISCHKA, K. - “Near Band-Edge Optical Properties of Cubic GaN with and without Carbon Doping”, *Microelectronics Journal* **35**, 73 (2004).
32. FERRAZ, A.C. and MIOTTO, R. - “A Comparative Study of the Interaction of Cyclopentene, Cyclohexene, and 1,4-cyclohexadiene with the Silicon (001) Surface”, *Surface Science* **566**, 713 (2004).
33. FERRAZ, A.C. and MIOTTO, R. - “Adsorption and Decomposition of Acetone on Si(001)”, *Applied Surface Science* **234**, 185 (2004).
34. FERREIRA, L.G.; TELES, L.K.; LEITE, J.R. and SCOLFARO, L.M.R. - “Ordering in Cubic  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  and  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  Alloys due to Biaxial Strain”, *Physica Status Solidi (c)* **1** (S2), S198 (2004).
35. FERRETI, A.; RUINI, A.; BUSSI, G.; MOLINARI, E. and CALDAS, M. J. - “Ab Initio Study of Transport Parameters in Polymer Crystals”, *Physical Review B* **69**, 205205 (2004).
36. FILETI, E.E.; CHAUDHURI, P. and CANUTO, S. - “Relative Strength of Hydrogen Bond Interaction in Alcohol-Water Complexes”, *Chemical Physics Letters* **400**, 494 (2004).
37. FILETI, E.E.; COUTINHO, K. and CANUTO, S. - “Is There a Favourite Isomer for the Hydrogen-Bonded Methanol in Water?”, *Advanced Quantum Chemistry* **47**, 51 (2004).



38. FILETI, E.E. and CANUTO, S. - "A Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Study of the Dipole Polarizability of Liquid Benzene", *Journal of Computational Methods in Science and Engineering* **4**, 559 (2004).
39. FONSECA, F.C.; CARNEIRO, A.S. and JARDIM, R.F. and KIMURA, T. - "Magnetization Steps in Phase-Separated Cr-Doped  $\text{Nd}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$  Manganites", *Journal of Applied Physics* **95**, 7085 (2004).
40. FONSECA, F.C.; SOUZA, J.A.; JARDIM, R.F.; MUCCILLO, R.; MUCCILLO, E.N.S.; GOVEA, D.; JUNG, M.H. and LACERDA, A.H. - "Transport Properties and Phase Separation in Polycrystalline  $\text{La}_{0.6}\text{Y}_{0.1}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$  Compounds with Different Pore Concentration", *Journal of the European Ceramic Society* **24**, 1271 (2004).
41. FROTA-PESSÔA, S. - "Magnetic Behaviour of 3d Impurities in CU, Ag, and Au: First-principles Calculations of Orbital Moments", *Physical Review B* **69**, 104401 (2004).
42. GARCIA, J.C.; LINO, A.T.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A. and SILVA JR, E.F. da - "First Principles Studies of Relativistic and Spin-Orbit Effects on the  $\text{HfO}_2$  Band Structures", *Physica Status Solidi (c)* **1** (S2), S236 (2004).
43. GARCIA, J.C.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; LINO, A.T.; FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A. and SILVA JR., E.F. da - "Effective Masses and Dielectric Function of Cubic  $\text{HfO}_2$ ", *Applied Physics Letters* **85** (21), 5022 (2004).
44. GOVEA-ALCAIDE, E.; MUNÉ, P. and JARDIM, R.F. - "Effects of Uniaxial and Isostatic Compacting Pressures on the  $J_c(\text{Ba})$  Behavior in  $\text{Bi}_{1.65}\text{Pb}_{0.35}\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_2\text{O}_y$ ", *Physica C - Superconductivity* **408**, 56 (2004).
45. GOVEA-ALCAIDE, E.; MUNÉ, P. and JARDIM, R.F. - "Inhomogeneous Distribution of Uniaxial Compacting Pressure and its Effects on Transport Properties of  $\text{Bi}_{1.65}\text{Pb}_{0.35}\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_2\text{O}_y$  superconductors", *Physica C - Superconductivity* **408**, 711 (2004).
46. GOYA, G.F. - "Handling the Particle Size and Distribution of  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  Nanoparticles through Ball Milling", *Solid State Communications* **130**, 783 (2004).
47. GOYA, G.F. - "Magnetic Interactions in Ball-Milled Spinel Ferrites", *Journal of Materials Science*.**39**, (número da página?) (2004).
48. GOYA, G.F. and MORALES, M.P. - "Field Dependence of Blocking Temperature in Magnetite Nanoparticles", *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials*.**20**, 673 (2004).

49. GOYA, G.F.; GOMEZ, S.L. and SHIBLI, S.M. - "Dipolar Interactions between Magnetite Nanoparticles in Frozen Ferrofluids and Ferronematics", *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials* **22**, 33 (2004).
50. GOYA, G.F.; VEITH, M.; RAPALAVICUITE, R.; SHEN, H. and MATHUR, S. - "Thermal Hysteresis of Spin Reorientation at Morin Transition in Alkoxide Derived Hematite Nanoparticles", *Applied Physics A - Mater* (volume?), (página?) (2004).
51. GRATENS, X.; BINDILATTI, V.; OLIVEIRA Jr., N.F.; SHAPIRA, Y.; FONER, S.; GOLACKI, Z. and HAAS, T.E. - "Magnetization Steps in  $Zn_{1-x}Mn_xO$ : Four Largest Exchange Constants and Single-Ion Anisotropy", *Physical Review B* **125209**, 69 (2004).
52. GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E. and LEITE, J.R. - "Anomalous Hall Effect in a Wide Parabolic Well", *Physica Status Solidi (c)* **1** (S2), S181-S187 (2004).
53. 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* **22**, 90 (2004).
54. 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", *Physica E* **22**, 336 (2004).
55. GUSEV, G.M.; SERGIO, C.S.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; LEITE, J.R.; ESTIBALS, O. and PORTAL, J.C. - "Charge Density Wave Instability in a Multicomponent Quantum Hall System", *Physica E* **22**, 115 (2004).
56. HADDAD, P.S.; DUARTE, E.; BAPTISTA, M.S.; GOYA, G.F.; LEITE, C.A.P. and ITRI, R. - "Synthesis and Characterization of Silica-Coated Magnetic Nanoparticles", *Progress in Colloid and Polymer Science* **128**, 232 (2004).
57. HENNANDEZ, M.Z.; LONGO, R.; COUTINHO, K. and CANUTO, S. - "Solute Relaxation on the Solvatochromism of Ortho-Betaine Dye. A Sequential Monte Carlo - Quantum Mechanics Study", *Physical Chemistry and Chemical Physics* **6**, 2088 (2004).
58. HENRIQUES, A.B.; OLIVEIRA, R.F.; LAMAS, T.E.; QUIVY, A.A.; PAMPLONA-PIRES, M.; YAVICH, B. and SOUZA, P.L. - "Luminescence from Miniband States in Heavily doped Superlattices", *Brazilian Journal of Physics* **34**, 650 (2004).
59. HENRIQUES, A.B.; HANAMOTO, L.K.; ABRAMOF, E.; UETA, A.Y. and OLIVEIRA RAPPL, P.H. de - "Magnetic Field induced Polarized Optical

- Absorption in Europium Chalcogenides”, *Aip Conference Proceedings* **772**, 979 (2004).
60. HENRIQUES, A.B.; HANAMOTO, L.K.; OLIVEIRA Jr., N.F.; OLIVEIRA RAPPL, P.H. de; UETA, A.Y. and ABRAMOF, E. - “Sharp Lines in the Absorption Edge of EuTe and Pb<sub>0.1</sub>Eu<sub>0.9</sub>Te in High Magnetic Fields”, *Journal of Physics Condensed Matter* **16**, 5597 (2004).
  61. HENRIQUES, A.B.; HANAMOTO, L.K.; TER HAAR, E.; ABRAMOF, E.; UETA, A.Y. and OLIVEIRA RAPPL, P.H. de - “Tuning of the Magnetic Field induced Sharp Band-Edge Optical Absorption in Europium Chalcogenides”, *International Journal of Modern Physics B* **18**, 3813 (2004).
  62. HENRIQUES, A.B.; L. HANAMOTO, L.K.; ABRAMOF, E.; OLIVEIRA RAPPL, P.H. de; UETA, A.Y. and OLIVEIRA Jr., N.F. - “Magnetic Field induced Absorption in Pb<sub>x</sub>Eu<sub>1-x</sub>Te Magnetic Semiconductors”, *Brazilian Journal of Physics* **34**, 687 (2004).
  63. HENRIQUES, A.B.; NICHOLAS, R.J. and DEACON, R.S. - “Monte Carlo Study of Miniband Conduction in Extreme Type-II Superlattices”, *Brazilian Journal of Physics* **34**, 605 (2004).
  64. HENRIQUES, A.B.; NICHOLAS, R.J.; DEACON, R.S. and MASON, N.J. - “Magnetoresistance Studies of Strongly coupled Superlattices”, *Physica E* **22**, 316 (2004).
  65. HENRIQUES, A.B.; OLIVEIRA, R.F.; LAMAS, T.E. ; QUIVY, A.A. and ABRAMOF, E.; “Measurement of Miniband Parameters of a Doped Superlattices by Photoluminescence in High Magnetic Fields”, *Journal of Physics D - Applied Physics* **37**, 2949 (2004).
  66. HENRIQUES, A.B.; OLIVEIRA, R.F.; LAMAS, T.E. and QUIVY, A.A. - “Van Hove Singularities detected by Photoluminescence in Doped AlGaAs/GaAs Superlattices”, *Aip Conference Proceeding* **772**, 979 (2004).
  67. HERNANDES, M.Z.; LONGO, R.; COUTINHO, K. and CANUTO, S. - “Solute Relaxation on the Solvatochromism of Ortho-Betaine Dyes. A Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Study”, *Physical Chemistry and Chemical Physics* **6**, 2088 (2004).
  68. HERNANDEZ, E.P.; ROMERO, S.A.; RECHENBERG, H.R.; REZENDE, S.M. and CORNEJO, D.R. - “Magnetic Properties of Mechanically alloyed MnO+FeCo”, *Journal of Alloys and Compounds* **369**, 269 (2004).
  69. KLAUTAU, A B. and FROTA-PESSÔA, S. - “Magnetic Properties of Co Nanowires on Cu(001) Surfaces”, *Physical Review B*, 193407 (2004).

70. 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* **22**, 332 (2004).
71. LARICO, R.; ASSALI, L.V.C. and MACHADO, W.V.M. - "Isolated Nickel Impurities in Diamond: A Microscopic Model for the Electrically Active Centers", *Applied Physics Letters* **84**, 720 (2004).
72. 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* **30**, 62 (2004).
73. 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* **34** (2B), 669 (2004).
74. 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", *Brazilian Journal of Physics* **34**, 678 (2B) (2004).
75. LEÓN-PÉREZ, F. de; MIOTTO, R. and FERRAZ, A.C. - "A Theoretical Study of Acrylonitrile Adsorption on Si(001)", *Brazilian Journal of Physics* **34**, 708 (2004).
76. LOURENÇO, S.A.; DIAS, I.F.L.; DUARTE, J.L.; LAURETO, E.; POCAS, L.C.; FILHO, D.O.T. and LEITE J.R. - "Thermal Expansion Contribution to the Temperature Dependence of Excitonic Transitions in GaAs and AlGaAs", *Brazilian Journal of Physics* **34** (2A), 517 (2004).
77. LUDWIG, V.; COUTINHO, K. and CANUTO, S. - "Sequential Classical-Quantum Description of the Absorption Spectrum of the Hydrated Electron", *Physical Review B* **70**, 214110 (2004).
78. MANTILLA-OCHOA, J.C.; BINDILATTI, V.; TER HAAR, E.; COAQUIRA, J.A.H.; SOUZA BRITO, G.E. de; GRATENS, X. and SAGREDO, V. - "Spin Glass Behavior in  $MnIn_2Se_4$  and  $Zn(1-x)Mn_xIn_2Se_4$  Magnetic Semiconductors", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **272**, 1308 (2004).
79. MANTILLA-OCHOA, J.C.; SOUZA BRITO, G.E. de; TER HAAR, E.; SAGREDO, V; and BINDILATTI, V. - "The Structure of  $Zn_{1-x}Mn_xIn_2Se_4$  Crystals Grown by Chemical Vapour Phase Transport", *Journal of Physics Condensed Matter* **16**, 3555 (2004).
80. MARQUES, M.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; FERREIRA, L.G. and LEITE, J.R. - "Microscopic Description of the Phase Separation Process in  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}N$  Quaternary Alloys", *Physical Review B* **70**, 073202 (2004).

81. MASSABNI, A.C.; CORBI, P.P.; MELNIKOV, P.; ZACHARIAS, M.A. and RECHENBERG, H.R. - "Synthesis and Spectroscopic Characterization of New Metal (II) Complexes with Methionine Sulfoxide", *Journal of Coordination Chemistry* **57**, 1225 (2004).
82. MATHUR, S.; VEITH, M.; RAPALAVICUITE, R.; SHEN, H.; MARTINS Filho, W.L.; BERQUO, T.S. and GOYA, G.F. - "Molecule Derived Synthesis of Nanocrystalline YFeO<sub>3</sub> and Investigations on its Weak Ferromagnetic Behaviour", *Chemical Materials* **16**, 1906 (2004).
83. MIOTTO, R.; FERRAZ, A.C. and SRIVASTAVA, G.P. - "Adsorption of C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>-C<sub>2</sub>O<sub>3</sub> on Si(001)", *Brazilian Journal of Physics* **34**, 563 (2004).
84. MIOTTO, R.; OLIVEIRA, M.C.; PINTO, M.M.; LEÓN-PÉREZ, F. de and FERRAZ, A.C. - "CH<sub>3</sub>CN on Si(001): Adsorption Geometries and Electronic Properties", *Brazilian Journal of Physics* **34**, 690 (2004).
85. MIOTTO, R.; OLIVEIRA, M.C.; PINTO, M.M.; LEÓN-PÉREZ, F. de and FERRAZ, A.C. - "Acetonitrile Adsorption on Si(001)", *Physical Review B* **69**, 235331 (2004).
86. MIRANDA, C.R.; ANTONELLI, A.; SILVA, A.J.R.da and FAZZIO, A. - "Vacancy-Like Defects in a-Si: A First Principles Study", *Journal of Non-Crystalline Solids* **400**, 338 (2004).
87. MONTE, A.F.G.; SOLER, M.A.G.; SILVA, S.W. da; RODRIGUES, B.B.D.; MORAIS, P.C. QUIVY, A.A. and LEITE, J.R. - "Carrier Diffusion in InGaAs/GaAs Quantum Wells grown on Vicinal GaAs(001) Substrates", *Physica E* **23**, 466 (2004).
88. NOVAES, F.D.; SILVA, E.Z. da; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Effect of Impurities on the Breaking of Au Nanowires", *Surface Science* **367**, 566 (2004).
89. 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* **30**, 67 (2004).
90. OLIVEIRA, R.F.; HENRIQUES A.B.; LAMAS, T.E.; QUIVY, A.A. and ABRAMOF, E. - "Optical Measurement of Miniband Dispersion and Bandgap Renormalization in Modulation-Doped AlGaAs/GaAs Superlattices", *International Journal of Modern Physics B* **18**, 3817 (2004).
91. ORELLANA, W.; MIWA, R.H. and FAZZIO, A. - "Stability and Electronic Properties of Carbon Nanotubes Adsorbed on Si(001)", *Surface Science* **728**, 566 (2004).

92. ORELLANA, W.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Diffusion-Reaction Mechanisms of Nitriding Species in SiO<sub>2</sub>", *Physical Review B* **70**, 125206 (2004).
93. PADUAN Filho, A.; GRATENS, X. and OLIVEIRA Jr., N.F. - "Field-Induced Magnetic Ordering in NiCl<sub>2.4</sub>SC(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>", *Physical Review B* **69**, n. 020405, 1 (2004).
94. PADUAN Filho, A.; OLIVEIRA Jr., N.F. and GRATENS, X.. - "High-field Magnetization in the Quantum Spin System NiCl<sub>2.4</sub>SC(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>", *Journal of Applied Physics* **95**, 7537 (2004).
95. PADUAN Filho, A.; SANTOS, R.H.A.; ALVES, W.A.; BECERRA, C.C.; BORIN, A.C. and FERREIRA, A.C. - "Molecular Structure and Intra and Intermolecular Magnetic Interactions in Chloro Bridge Copper Dimmers", *Inorganica Chimica Acta* **357** 2269 (2004).
96. 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", *Brazilian Journal of Physics* **34**, 568 (2004).
97. PAIVA, R. de; ALVES, J.L.A.; NOGUEIRA, R.A.; LEITE, J.R. and SCOLFARO, L.M.R. - "Diluted Magnetic Ga<sub>1-x</sub>MnN Alloys: a First-Principles Study", *Brazilian Journal of Physics* **34**, 647 (2B) (2004).
98. QUIVY, A.A.; DA SILVA, M.J.; LAMAS, T.E.; DA SILVA, E.C.F. and J.R. LEITE - "Large Self-Assembled InAs/GaAs Quantum Dots with an Optical Emission Above 1.3 μm", *Physica Status Solidi(c)* **1**, S133 (2004).
99. RENARD, V.; KVON, Z.D.; GUSEV, G.M. and PORTAL, J.C. - "Large Positive Magnetoresistance in a High-Mobility Two-Dimensional Electron Gas: Interplay of Short and Long-Range Disorder", *Physical Review B* **70**, 033303 (2004).
100. RIVELINO, R. and CANUTO, S. - "Conformational Stability of Lactonitrile-Water Complexes: An Ab Initio Study", *Journal of Physical Chemistry A* **108**, 1601 (2004).
101. RIVELINO, R.; CANUTO, S. and COUTINHO, K. - "Conformational Stability of Furfural in Aqueous Solution: The Role of Hydrogen Bonding", *Brazilian Journal of Physics* **34**, 84 (2004).
102. RODRIGUES, C.G.; FERNANDEZ, J.R.L.; LEITE, J.R.; CHITTA, V.A.; FREIRE, V.N.; VASCONCELOS, A.R. and LUZZI, R. - "Hole Mobility in Zincblende c-GaN", *Journal of Applied Physics* **95**, 4914 (2004).
103. RODRIGUES, S.C.P.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; CUNHA LIMA, I.C. da; SIPAHI, G.M. and BOSELLI, M.A. - "Charge and Spin Distribution

- in GaMnAs/GaAs Ferromagnetic Multilayers”, *Physical Review B* **70**, 165308 (2004).
104. RUINI, A.; FERRETI, A.; BUSSI, G.; MOLINARI, E. and CALDAS, M. J. - “Relationship between Structural and Optoelectronic Properties in Semiconducting Polymers”, *Semiconductor Science and Technology* **19**, S362 (2004).
105. SAGREDO, V.; PINEDA, F. and TER HAAR, E. - “Magnetic properties of the Mn<sub>1-x</sub>FexIn<sub>2</sub>S<sub>4</sub> spinel compounds”, *Journal of Alloys and Compounds* **369**, n. 1, 84 (2004).
106. SANDIM, M.J.R. and JARDIM, R.F. - “Thermopower and Electrical Resistance of the Granular Sm<sub>1.85</sub>Ce<sub>0.15</sub>CuO<sub>4-y</sub> Superconductor”, *Physica C - Superconductivity* **408**, 677 (2004).
107. SANTOS, A.D., SCHOENMAKER, J., LANCAROTTE, M.S., SEABRA, A. C., SOUCHE, Y. - “Magnetic Characterization of Microscopic Particles by Mo-Snom”, *Journal of Microscopy* **214**, n.1, 22 (2004).
108. SANTOS, A.D.; MARTINS, A. and FANTINI, M.C.A. - “Growth of L10 ordered FePt Alloy Films at Reduced Temperatures”, *Physica Status Solidi (a) Applied Research* **201**, n.5, 837 (2004).
109. SANTOS, A.D.; SOUCHE, Y.; WAGNER, E. and FOURNIER, T. - “Interaction between Surface Plasmon and Magnetic Material”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **272**, 2288 (2004).
110. SCOPEL, W.L.; SILVA, A.J.R. da; ORELLANA, W. and FAZZIO, A. - “Comparative Study of Defect Energetics in HfO<sub>2</sub> and SiO<sub>2</sub>”, *Applied Physics Letters* **84**, 1492 (2004).
111. SILVA, A.J.R. da; FAZZIO, A. and ANTONELLI, A. - “Stabilization of Substitutional Mn in Silicon-Based Semiconductors”, *Physical Review B* **70**, 193205 (2004).
112. SILVA, A.J.R. da; FAZZIO, A.; SANTOS, R.R. dos and OLIVEIRA, L.E. - “First Principles Study of the Ferromagnetism in Ga<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>As Semiconductors”, *Journal of Physics: Condensed Matter* **16**, 8243 (2004).
113. SILVA, C.R.S. da; JUSTO, J.F. Justo and FAZZIO, A. - “On the Reversibility of Hydrogen Effects on the Properties of Amorphous Silicon Carbide”, *Journal of Non-Crystalline Solids* **299**, 338 (2004).
114. SILVA, E.Z. da; NOVAES, F.D.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - “Theoretical Study of the Formation, Evolution, and Breaking of Gold Nanowires”, *Physical Review B* **69**, 115411 (2004).

115. SILVA, E.Z. da; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - “Breaking of Gold Nanowires”, *Computational Materials Science* **30**, 73 (2004).
116. SILVA, P.; CHALBAUD, L. de TER HAAR, E. and SAGREDO, V. - “Magnetic Properties of the Reentrant  $\text{CdGa}_{2-2x}\text{Cr}_{2x}\text{Se}_4$ ”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **272**, E1551 (2004).
117. SIPAHI, G.M.; RODRIGUES, S.C.P.; CUNHA LIMA, I.C. da; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - “Luminescence Spectra in Metallic and Ferromagnetic GaMnAs/GaAs Multilayers: A Self-Consistent Super-Cell Luttinger-Kohn k.p. Calculation”, *Physica Status Solidi (c)* **1** (S2), S282 (2004).
118. SIPAHI, G.M.; RODRIGUES, S.C.P.; SCOLFARO, L.M.R. and CUNHA LIMA, I.C. da - “Charge and Spin Distribution in Ferromagnetic Mn-Doped InGaAs/GaAs Multilayers”, *Applied Physics Letters* **85** (25), 6209 (2004).
119. SOTOMAYOR, N.M.; GUSEV, G.M. and LEITE, J.R. - “Evolution from Commensurability to Size-Effects Structures in Three Dimensional Billiards”, *Brazilian Journal of Physics* **34**, 638 (2B) (2004).
120. SOTOMAYOR, N.M.; GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; BYKOV, A.A.; KALAGIN, A.K.; TOROPOV, A I. and PORTAL, J.C. - “Negative Linear Classical Magnetoresistance in a Corrugated Two-Dimensional Electron Gas”, *Physical Review B* **70**, 235326 (2004).
121. SOUSA, E.C.; SOUSA, M.H.; RECHENBERG, H.R.; GOYA, G.F.; LARA, M.C.F.L., TOURINHO, F.A. and DEPEYROT, J. - “Enhanced Surface Anisotropy evidenced by Mössbauer Spectroscopy in Nickel Ferrite Nanoparticles”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **272**, 1215 (2004).
122. TELES, L K.; MARQUES, M.; FERREIRA, L. G.; SCOLFARO, L. M. R. and LEITE, J. R. - “Phase Separation, Effects of Biaxial Strain, and Ordered Phase Formations in Cubic Nitride Alloys”, *Microelectronics Journal* **35**, 53 (2004).
123. 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* **34**, 593, n° 2A (2004).
124. TELES, L.K.; FERREIRA, L.G.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - “Theoretical Study of Strain-Induced Ordering in Cubic  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  Epitaxial Layers”, *Physical Review B* **69**, 245317 (2004).
125. TER HAAR, E. and MARTIN, R.V. - “Phase Boundary Detection for Dilution Refrigerators”, *Review of Scientific Instruments* **75**, 3071 (2004).



126. TORIKACHVILI, M.S.; BOSSI, I.; BRIEN, J.R.O.; FONSECA, F.C.; MUCCILLO, R. and JARDIM, R.F. - "Superconductivity and Magnetism in  $Ru_{1-x}Ir_xSr_2GdCu_2O_8$  Compounds", *Physica C - Superconductivity* **408**, 195 (2004).
127. VARANDA, L.C.; MORALES, M.P.; GOYA, G.F.; IMAIZUMI, M.; SERNA, C.J. and JAFELICCI, M. - "Magnetic Properties of a Circular  $Fe_{1-x}RE_x$  (RE = Nd, Sm, Eu, Tb; x = 0, 0.05, 0.10) Metallic Nanoparticles", *Materials Science and Engineering B-Solid State Materials for Advanced Technology* **112**, 188 (2004).
128. VENEZUELA, P.; MIWA, R.H. and FAZZIO, A. - "Carbon in  $Si_xGe_{1-x}$ : An Ab Initio Investigation", *Phys. Rev. B* **69**, 115209 (2004)

### **5d - Trabalhos Aceitos para Publicação:**

1. ASSALI, L.V.C.; LARICO, R.; MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F - "Nickel-Vacancy Complexes in Diamond: An Ab Initio Investigation", *Materials Science Forum* (2004).
2. ASSALI, L.V.C.; MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F - "Manganese Impurity in Boron Nitride and Gallium Nitride", *Materials Science Forum* (2004).
3. COUTINHO, K. and CANUTO, S. - "The Dipole Polarizability of  $F^-$  in Aqueous Solution. A Sequential Monte Carlo - Quantum Mechanics Study", *Advanced Quantum Chemistry* (2004).
4. CUNHA LIMA, I.C. da; GUSEV, G.M. and LEITE, J.R. - "Spin Polarization by Tilted Magnetic Field in Wide  $Ga_{1-x}Al_xAs$  Parabolic Quantum Wells", *Journal of Superconductivity* (2004).
5. FILETI, E.E. and CANUTO, S. - "An ab initio NMR Study of the Isomeric Hydrogen Bonded  $CH_3OH-OH_2$  and  $CH_3HO-H_2O$  Complexes", *International Journal of Quantum Chemistry* (2004).
6. FILETI, E.E. and CANUTO, S. - "Calculated Infrared Spectra of the Hydrogen-Bonded Methanol-Water, Water-Methanol and Methanol-Methanol Complexes", *International Journal of Quantum Chemistry* (2004)
7. GUSEV, G.M.; DUARTE, C.A.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; LEITE, J.R.; BAKAROV, A.K. and TOROPOV, A.I. - "Spin-Dependent Hall Effect in a Parabolic Well with a Quasi-Three-Dimensional Electron Gas", *Physical Review B* (2004).

8. JUSTO, J.F.; SILVA, C.R.S da; PEREYRA, I and ASSALI, L.V.C. - “Structural and Electronic Properties of  $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x\text{O}_2$ ”, *Materials Science Forum* (2004).
9. KLAUTAU, A. B. and FROTA-PESSÔA, S. - “Orbital Moments of 3d Adatoms and Co Nanostructures on Cu(001) Surfaces”, *Surface Science* (2004).
10. LAMAS, T.E.; QUIVY, A.A.; MARTINI, S.; DA SILVA, M.J. and LEITE, J.R. - “Smooth p-type GaAs(001) Films Grown by Molecular-Beam Epitaxy using Silicon as the Dopant”, *Thin Solid Films* (2004).
11. LAMAS, T.E.; QUIVY, A.A.; SERGIO, C.S.; GUSEV, G.M. and PORTAL, J.C. - “High Mobility of a Three-Dimensional Hole Gas in Parabolic Quantum Wells Grown on GaAs(311)A Substrates”, *Journal of Applied Physics* (2004).
12. LARICO, R.; MACHADO, W. V. M.; ASSALI, L.V.C. and JUSTO, J.F. - “A theoretical model for the nickel-related defect centers in diamond”, *Diamond and Related Materials* (2004).
13. MACHADO, W.V.M.; JUSTO, J.F. and ASSALI, L.V.C. - “3d-Transition Metals in Cubic and Hexagonal Silicon Carbide”, *Materials Science Forum* (2004).
14. MARQUES, M.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R. and FERREIRA, L.G. - “Ab Initio Studies of Indium Separated Phases in AlGaInN Quaternary Alloys”, *Physica Status Solidi (c)* (2004).
15. ORMEÑO, P.G.G.; PETRILLI, H.M. and SCHÖN, C.G. - “Ab Initio Calculation of the BCC Mo - Al (Molybdenum – Aluminium) Phase Diagram: Implications for the Nature of the Ga - AlMo phase”, *Scripta Mater* (2004).
16. PAIVA, R. de; ALVES, J.L.A.; NOGUEIRA, R.A.; LEITE, J.R. and SCOLFARO L.M.R. - “Cubic Binary Compounds MnN and MnAs and Diluted Magnetic  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$  Semiconductor Alloys: A First-Principle Study”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (2004).
17. RIVELINO, R. and CANUTO, S. - “A Theoretical Investigation of Hydrogen Bonding in Lactonitrile-Water Complexes”, *International Journal of Quantum Chemistry* (2004).
18. SILVA, C.R.S.; JUSTO, J.F.; PEREYRA, I. and ASSALI, L.V.C. - “A First Principles Investigation on Hypothetical Crystalline Phases of Silicon Oxycarbide”, *Diamond and Related Materials* (2004).
19. ZANELLA, I.; FAZZIO, A. and SILVA, A.J.R. da - “Electronic and Structural Properties of  $\text{C}_{59}\text{Si}$  on the Monohydride Si(100) Surface”,

*International Journal of Quantum Chemistry* (2004).

### **5e - Publicação de Capítulos de Livros:**

1. CANUTO, S.; COUTINHO, K. and COSTA CABRAL, B.J. - “*Hydrogen Bonding and the Energetics of Homolytic Dissociation in Solution - A Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Approach*”, in *Fundamental World of Quantum Chemistry. A Tribute Volume to the Memory of Per-Olov Löwdin*, Vol. 3, pág. 581-599, Eds. E.J. Brändas and E.S. Kryachkov, Klüwer Academic Publishers (2004).
2. SCOLFARO, L.M.R., TELES, L.K., MARQUES, M., FERREIRA, L.G., AND LEITE, J.R. - “Phase Separation and Ordering in Cubic Ternary and Quaternary Nitride Alloys”, 455-478, cap.16 do livro “*Optoelectronic Devices: III-Nitrides*”, Editado por M. Razeghi e M. Henini, Editora Elsevier (2004).

### **5f - Publicação de Capítulo de Revista:**

1. KNOBEL, M. and GOYA, G.F. - “Ferramentas Magnéticas Na Escala Do Átomo”, *Revista Scientific American* **30**, 58-66 (2004)

### **5g - Publicação de Livros:**

1. CANUTO, S. (Editor) with BARBOSA, M. - Water - The Essential Molecule, Special Edition, *Brazilian Journal of Physics*, Vol. 34 n.1 (2004).
2. MUNE, P. and JARDIM, R.F. - Granular Structure, Trapped Flux, and Transport Properties Measurements in High Tc Superconductors. A. Narlinkar. (Org.). *Studies of High Temperature Superconductors* (2004).
3. VIANNA, J.D.M.; FAZZIO, A. e CANUTO, S. - “*Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos - Simulação Computacional*”, 1ª edição, Editora Livraria da Física, São Paulo, SP (2004)
4. WATARI, K. - “*Mecânica Clássica*”, Vol. 1, 2ª edição, Editora Livraria da Física, São Paulo, SP (2004).