

Departamento de Física dos
Materiais e Mecânica

D F M T

Relatório de Atividades

2002

Instituto de Física
Universidade de São Paulo

Editor

Prof. Dr. Hercílio Rodolfo Rechenberg
Chefe do DFMT

Editoração

Rosana Batista Gimenes Biz
Secretária do DFMT

Fonte de Dados

Cecília Aparecida Cavalheiro Maia

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

Iran Mamedes de Amorim

Secretário do Laboratório de Materiais Magnéticos - LMM

Mônica Jimenez Clauzet

Secretária do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores – LNMS-MBE

Marisa Fernandes da Silva

Sandra Regina Rodrigues Ribeiro

Secretárias do Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Impressão

Gráfica do IFUSP (fevereiro de 2004)

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 2002.....
- 2b. Disciplinas de Pós-Graduação Ministradas no 1º Semestre de 2002
- 2c. Disciplinas de Graduação Ministradas no 2º Semestre de 2002.....
- 2d. Disciplinas de Pós-Graduação Ministradas no 2º Semestre de 2002
- 2e. Seminários Proferidos no DFMT
- 2f. Projetos de Pós-Doutorado
- Concluídos
- Em Andamento
- 2g. Doutorados.....
- Concluídos
- Em Andamento
- 2h. Mestrados
- Concluídos
- Em Andamento
- 2i. Projetos de Iniciação Científica

3 - ATIVIDADES DE EXTENSÃO E GESTÃO ACADÊMICA

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

4 - ATIVIDADES DE PESQUISA

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

5 - PRODUÇÃO CIENTÍFICA

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

1 - COMPOSIÇÃO DO DEPARTAMENTO

1a - Chefia:

Chefe	Suplente
HERCÍLIO RODOLFO RECHENBERG (23.02.2000 a 22.02.2002)	NEI FERNANDES DE OLIVEIRA JR. (23.02.2000 a 22.02.2002)
(23.02.2002 a 22.02.2004)	(23.02.2002 a 22.02.2004)

1b - Conselho Departamental:

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

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

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

REPRESENTANTES DISCENTES - PÓS-GRADUAÇÃO (14.08.2001 a 13.08.2002)	
Titular	Suplente
Márcia Tsuyama Escote (defendeu o doutorado em 06.02.2002)	Gustavo Martini Dalpian

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

REPRESENTANTES DISCENTES - PÓS-GRADUAÇÃO (30.09.2002 a 29.09.2003)	
Titular	Suplente
Gustavo Martini Dalpian	

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

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

PROFESSORES ASSOCIADOS (MS-5)

André Bohomoletz Henriques	RDIDP
Antônio Domingues dos Santos	RDIDP
Armando Paduan Filho	RDIDP
Guennadii Michailovich Gusev	RDIDP
Helena Maria Petrilli	RDIDP
Lucy Vitória Credidio Assali	RDIDP
Renato de Figueiredo Jardim	RDIDP
Valdir Bindilatti	RDIDP

PROFESSORES DOUTORES (MS - 3)

Antônio José Roque da Silva	RDIDP
Carlos Henrique Westphal (2)	RDIDP
Carmen Silvia de Moya Partiti	RDIDP
Euzi Conceição Fernandes da Silva	RDIDP
Ewout Ter Haar	RDIDP
Gerardo Fabián Goya	RDIDP
Kazunori Watari	RDIDP
Luísa Maria Ribeiro Scolfaro	RDIDP
Valquíria Villas Boas Gomes Missell (3)	RDIDP

(1) Aposentadoria publicada no Diário Oficial de 22.05.2002.

(2) Aposentadoria publicada no Diário Oficial de 22.02.2002.

(3) Afastamento, com prejuízos dos vencimentos e das demais vantagens do cargo, de 29.10.2001 a 28.10.2003.

1d - Pessoal Técnico e Administrativo:

TÉCNICO:

<p>Carlos Alberto Barioni Eronides Alves de Almeida Fábio Henrique Grossi Flávio do Carmo Fontenelle José Alexandre dos Santos José Geraldo Chagas José Teodósio da Silva Luiz Carlos dos Santos Marcelo Shiroma Lancarotte Márcia Ribeiro Marco Antônio Meira 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</p>

ADMINISTRATIVO:

Secretária de Departamento:

Rosana Batista Gimenes Biz

Secretários de Grupos de Pesquisas/Laboratórios:

Cecília Aparecida Cavalheiro Maia	Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas (a) Grupo de Baixas Temperaturas (b) Grupo de Transição de Fase e Supercondutividade
Iran Mamedes de Amorim	Laboratório de Materiais Magnéticos
Mônica Jimenez Clauzet Admitida em 22.02.2002.	Laboratório de Novos Materiais Semicondutores
Marisa Fernandes da Silva Sandra Regina Rodrigues Ribeiro Transferida do Departamento de Física Experimental para o Departamento de Física dos Materiais e Mecânica em 23.10.2002.	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 2002:

Docentes	Disciplinas	Sigla
André Bohomoletez Henriques	Introdução à Física Atômica e Molecular	FNC 0315
Antônio Domingues dos Santos	Introdução às Medidas Físicas para Farmácia	FAP 0181
Antônio José Roque da Silva	Física II	FEP 0112
Armando Corbani Ferraz	Eletricidade I	FGE 0270
Armando Paduan Filho	Laboratório de Física Moderna	FNC 0377
Carlos Castilla Becerra	Física para Engenharia III	FGE 2245
Carmen Silvia de Moya Partiti	Introdução às Medidas em Física	FAP 0152
Euzi Conceição F. da Silva	Introdução à Física	FAP 0100
Ewout Ter Haar	Introdução às Medidas em Física	FAP 0181
Gerardo Fabián Goya	Física Geral e Experimental para Engenharia I	FEP 2195
Guennadii Michailovich Gusev	Laboratório de Física III - Escola Politécnica	FGE 2297
Helena Maria Petrilli	Física para Engenharia IV	FAP 2296
Hercílio Rodolfo Rechenberg	Laboratório de Física para Ciências Biológicas	FGE 1189
José Roberto Leite	Eletricidade I	FGE 0270
Kazunori Watari	Mecânica II	FMT0306
Lucy Vitória Credidio Assali	Introdução à Física	FAP 0100
Luísa Maria Ribeiro Scolfaro	Física III - Instituto de Química	FGE 0211
Nei Fernandes Oliveira Jr	Introdução às Medidas em Física	FAP 0181
Renato de Figueiredo Jardim	COBRANDO CARGA DUPLA	
Sylvio Roberto Accioly Canuto	Física para Ciências Biológicas	FGE 1187
Valdir Bindilatti	Termodinâmica	FMT0308
Valquíria Villas Boas Gomes Missell	AFASTADA COM PREJUÍZOS DOS VENCIMENTOS	

2b - Disciplinas de Pós-Graduação Ministradas no Primeiro Semestre de 2002:

Docentes	Disciplinas	Sigla
Adalberto Fazzio	Física do Estado Sólido II	FMT0835
Armando Corbani Ferraz	Preparação Pedagógica de Ensino	FMT0869

2c - Disciplinas de Graduação Ministradas no Segundo Semestre de 2002:

Docentes	Disciplinas	Sigla
Adalberto Fazzio	COBRANDO CARGA DUPLA	
André Bohomoletez Henriques	COBRANDO CARGA DUPLA	
Antônio Domingues dos Santos	Física dos Materiais	FMT0502
Antônio José Roque da Silva	Introdução à Física do Estado Sólido	FMT0402
Armando Corbani Ferraz	Eleticidade II	FGE 0271
Armando Paduan Filho	Física Experimental	FGE2255
Carlos Castilla Becerra	Física para Engenharia IV	FAP 2296
Carmen Silvia de Moya Partiti	Laboratório de Física para Engenharia IV	FAP 2298
Euzi Conceição F. da Silva	Fundamentos da Mecânica	FAP 0151
Ewout Ter Haar	Física para Ciências Farmacêuticas I	FAP 0184
Gerardo Fabián Goya	Mecânica para Geociências	FAP 0192
Guennadii Michailovich Gusev	Laboratório de Física para Engenharia IV	FAP 2298
Helena Maria Petrilli	Física para Engenharia IV	FAP 2296
Hercílio Rodolfo Rechenberg	Laboratório de Física para Engenharia II	FEP 2198
José Roberto Leite	Eleticidade II	FGE 0271
Kazunori Watari	COBRANDO CARGA DUPLA	
Lucy Vitória Credidio Assali	Física I	FEP 0111
Luísa Maria Ribeiro Scolfaro	Física IV	FGE2250
Nei Fernandes Oliveira Jr	Termodinâmica I	FMT0159
Renato de Figueiredo Jardim	LICENÇA-PRÊMIO	
Sylvio Roberto Accioly Canuto	Introdução à Física Atômica e Molecular	FNC 0315
Valdir Bindilatti	Introdução à Mecânica Estatística	FMT0401
Valquíria Villas Boas Gomes Missell	AFASTADA COM PREJUÍZOS DOS VENCIMENTOS	

2d - Disciplinas de Pós-Graduação Ministradas no Segundo Semestre de 2002:

Docentes	Disciplinas	Sigla
Adalberto Fazzio	Física Computacional na Ciência de Materiais	FMT834
	Física do Estado Sólido	FMT814
Armando Corbani Ferraz	Preparação Pedagógica de Ensino	FMT0869

2e - Seminários Proferidos no DFMT:

“Spectroscopy and Chemistry of Semiconductor Surfaces: Fundamental Studies and Future Applications”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Dr. Peter Hess, Universität Heidelberg, Physikalisch-Chemisches Institut, Alemanha

Data: 21.02.2002

“Spontaneous Assembly of Perfectly Ordered Identical-Size Nanocluster Arrays”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Gustavo Martini Dalpian, IFUSP

Data: 22.03.2002

“A Física de Defeitos em Semicondutores II-VI”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Dr. Su-Huai Wei, National Renewable Energy Laboratory - NREL, Colorado, E.U.A.

Data: 12.04.2002

“Collapse of the Quantum Hall Ferromagnet States in Bilayer Systems due to Many-Body Edge Effects”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Dr. Oleg Balev, Universidade Federal de São Carlos, Departamento de Física

Data: 17.04.2002

“Estudo da Segregação de In em Camadas Epitaxiais $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Crescidas sobre Substratos de GaAs (001)”

Seminário do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores

Sandro Martini, IFUSP

Data: 25.04.2002

“Processos de Recombinação em Pontos Quânticos Auto-Organizados de InAs”

Seminário do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores

Celso de Araújo Duarte, IFUSP

Data: 02.05.2002

“Shubnikov – De Haas Oscillation in 2D and 3D Electron GAS”

Seminário do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores

Cássio Sangüini Sérgio, IFUSP

Data: 13.05.2002

“Atomic and Conductance Properties of Metals Nanowires”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Dr. Varlei Rodrigues, Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS,
Campinas, SP

Data: 22.05.2002

“Magnetismo de Nanoestruturas e Estabilidade Coloidal”

Seminário dos Laboratórios de Cristalografia e de Materiais Magnéticos e
Mössbauer

Prof. Dr. Jerome Depeyrot, Universidade de Brasília - UnB, Departamento de Física

Data: 24.05.2002

“Donors in HVPE and MOCVD GaN”

Seminário do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores

Prof. Dr. Jaime A. Freitas Jr., Naval Research Laboratory, ESTD - Electronic
Materials Branch

Data: 27.05.2002

**“Non Linear Resonances in a Quasi Three-Dimensional Electron Billiard
System”**

Seminário do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores

Nilo Mauricio Sotomayor Choque, IFUSP

Data: 02.06.2002

“Propriedades Estruturais da Liga Quaternária $Al_xGa_yIn_{1-x-y}N$ ”

Seminário do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores

Marcelo Marques, IFUSP

Data: 17.06.2002

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

Seminário do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores

Adriano Manoel dos Santos, IFUSP

Data: 1º.07.2002

**“Um Método de Primeiros Princípios para Isolantes na Presença de Campos
Elétricos Finitos”**

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Dr. Ivo Nuno Saldanha do Rosário e Souza, Rutgers University, Department
of Physics and Astronomy, E.U.A.

Data: 19.07.2002

“Estágios Iniciais do Crescimento de Si Próximo a Degraus em Si (100)”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Gustavo Martini Dalpian, IFUSP

Data: 20.08.2002

**“Interação de Muitos Corpos e Efeitos de Correlação Eletrônica em Ligações de
Hidrogênio: Um Estudo Ab Initio de Cadeias Lineares de HCN”**

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais
Roberto Rivelino Melo Moreno, IFUSP
Data: 30.08.2002

“Helium Trapping by Solid Hydrogen-Importance for Muon Catalyzed Fusion as Energy Source”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
Prof. Dr. Tara Prasad Das, State University of New York at Albany, Department of Physics, E.U.A.
Data: 03.09.2002

“Exchange em Arquiteturas de Computação Quântica Baseadas em Silício”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais
Profa. Dra. Belita Koiller, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Física, Rio de Janeiro
Data: 13.09.2002

“Teoria do Funcional da Densidade para os Modelos de Hubbard e Hubbard-Peierls”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
Dr. Neemias Alves de Lima, Universidade de São Paulo, Instituto de Física de São Carlos
Data: 18.09.2002

“Efeitos de Spin no Processo de Oxidação da Interface Si/SiO₂”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais
Dr. Walter Manoel Orellana Muñoz, IFUSP
Data: 27.09.2002

“Carregamento e Propriedades de Spin de Elétrons Aprisionados no Estado Fundamental de Pontos Quânticos de InAs”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
Prof. Dr. Gilberto Medeiros Ribeiro, Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS, Campinas, SP
Data: 16.10.2002

“Caracterização de Filmes Finos e Novos Materiais por meio de Técnicas Modernas de Difração de Raios X”

Seminário Extra do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
Prof. Dr. Mauro Sardela, University of Illinois, Centre for Microanalysis of Materials, E.U.A.
Data: 16.10.2002

“Usando Simulação Monte Carlo para Estudar Mudanças Conformacionais de Moléculas e Estabilidade em Meio Líquido”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Profa. Dra. Kaline Rabelo Coutinho, Universidade de Moji das Cruzes - UMC, Moji das Cruzes, São Paulo

Data: 18.10.2002

“Interações de Van der Waals dentro da DFT: O Papel do Funcional Energia de Troca e Correlação”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Frederico Ayres de Oliveira Neto, IFUSP

Data: 25.10.2002

“Propriedades Físicas de Ligas Semicondutoras Ternárias e Quaternárias envolvendo os Nitretos do Grupo-III”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Profa. Dra. Luísa Maria Ribeiro Scolfaro, IFUSP

Data: 30.10.2002

“Diagramas de Fases por Cálculos Ab Initio”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Pablo Guillermo Gonzales Ormeño, IFUSP

Data: 1º.11.2002

“Variational Calculation of Many-Body Energies and Wave Functions from DFT”

Seminário do Grupo Teórico de Materiais

Dr. Klaus W. Capelle, Universidade de São Paulo, Instituto de Química de São Carlos, SP

Data: 11.11.2002

“Orientação de Cristais Líquidos por meio de Azo-Dye”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Profa. Dra. Elisabeth Andreoli de Oliveira, IFUSP

Data: 20.11.2002

“Interação de Van der Waals: Importante e Onipresente”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Prof. Dr. Sylvio Roberto Accioly Canuto, IFUSP

Data: 22.11.2002

“Interações Magnéticas de Impurezas 3d em Metais Nobres”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais

Profa. Dra. Sônia Frota-Pessôa, IFUSP

Data: 29.11.2002

“Hidretos Metálicos para o Armazenamento de Hidrogênio”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

Prof. Dr. Paulo Emílio Valadão de Miranda, Universidade Federal do Rio de Janeiro,
Laboratório de Hidrogênio - PEMM - COPPE, Rio de Janeiro, RJ
Data: 20.11.2002

“Growth and Optical Properties of Quantum Dot Structures in II-VI Semiconductors”

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
Prof. Dr. Detlef Schikora, Universidade de Paderborn, Paderborn, Alemanha
Data: 04.12.2002

“Biomolecular Nanostructures in Electronic Devices: A Computational Approach”

Journal Club do Grupo Teórico de Materiais
Profa. Dra. Rosa di Felice, Università di Modena, Modena, Itália
Data: 13.12.2002

2f - Projetos de Pós-Doutorado:

Concluídos

Dr. César Renato Simenes Silva

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais
Supervisor: Prof. Dr. Adalberto Fazzio
Título do Projeto: Desenvolvimento de Algoritmos de Escala Múltipla para Materiais
Bolsa FAPESP - Proc. nº 98/11998-0
Processo USP nº 99.1.2397.1.3
Primeira Vigência: 1º de janeiro de 1999 - 31 de dezembro de 1999
Segunda Vigência: 1º de janeiro de 2000 - 31 de dezembro de 2000
Terceira Vigência: 1º de janeiro de 2001 - 31 de dezembro de 2001
Quarta Vigência: 1º de janeiro de 2002 - 31 de dezembro de 2002

Dr. Jose Antonio Huamani Coaquira

Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas (LESBT)
Supervisores: Prof. Dr. Nei Fernandes de Oliveira Jr.
Prof. Dr. Valmir A.Chitta
Título do Projeto: Caracterização de Estruturas de Semicondutores Magnéticos
Diluídos de Compostos IV-VI Crescidos por MBE
Bolsa FAPESP - Proc. nº 01/02737-3 -
Processo USP nº 99.1.11998.1.6
Primeira Vigência: 1º junho de 2001 - 31 de maio de 2002
Segunda Vigência: 1º junho de 2002 - 30 de setembro de 2002

Dr. Marcionílio Teles de Oliveira Silva

Grupo de Novos Materiais Semicondutores (LNMS)
Supervisor: Prof. Dr. José Roberto Leite
Título do Projeto: Estudo de Propriedades Ópticas de GaN dopado com

Si, Mn e C, e de Ligas de $Al_x Ga_{1-x} N$ e de $In_{1-x-y} Ga_x Al_y N$

Bolsa FAPESP - Proc. n° 99/07874-7

Processo USP n° 2000.1.3662.1.4

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

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

Terceira Vigência: 1° de dezembro de 2001 - 31 de janeiro de 2002

Dr. Pedro Paulo de Mello Venezuela

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Supervisor: Prof. Dr. Adalberto Fazzio

Título do Projeto: Estrutura Eletrônica e Configuracional de Ligas Silício-Germânio

Bolsa FAPESP - Proc. n° 00/11062-7

Processo USP n° 2000.1.5300.1.3

Primeira Vigência: 1° de fevereiro de 2001 - 31 de janeiro de 2002

Segunda Vigência: 1° de fevereiro de 2002 - 13 de junho de 2002

Dr. Ronei Miotto

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Supervisor: Prof. Dr. Armando Corbani Ferraz

Título do Projeto: Adsorção e Dissociação de Átomos e Moléculas em Superfícies

Semicondutoras e seu Papel como Precursor no Crescimento Epitaxial de

Hetero-estruturas e na Formação de Interfaces

Bolsa FAPESP - Proc. n° 00/10976-5

Processo USP n° 2000.1.5301.1.0

Primeira Vigência: 1° de janeiro de 2001 - 31 de dezembro de 2001

Segunda Vigência: 1° de janeiro de 2002 - 31 de maio de 2002

Em andamento

Dr. Fábio Coral Fonseca

Grupo de Transição de Fase e Supercondutividade

Supervisor: Prof. Dr. Renato de Figueiredo Jardim

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

Bolsa FAPESP - Proc. n° 01/04231-0

Processo USP n° 2001.1.24510.1.0

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

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

Dr. Fernando de León-Pérez

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Supervisor: Prof. Dr. Armando Corbani Ferraz

Título do Projeto: Adsorção e Dissociação Molecular nos Processos de Passivação de Superfícies Semicondutoras

Bolsa FAPESP - Proc. n° 02/01356-9

Processo USP nº 2002.1.23316.1.6
Primeira Vigência: 1º de agosto de 2002 - 31 de julho de 2003

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 $Al_zGa_{1-z}N/GaN$ 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 de maio de 2002 - 30 de abril de 2003

Dra. Lara Kühn Teles

Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS)
Supervisor: Prof. Dr. José Roberto Leite
Título do Projeto: Propriedades Estruturais, Eletrônicas e Termodinâmicas de Ligas Ternárias formadas por Nitretos do Grupo-III
Bolsa FAPESP - Proc. 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

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 - 31 de abril de 2003

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 1307953
Primeira Vigência: 1º de junho de 2002 - 31 de maio de 2003

Dr. Nilo Maurício Sotomayor Choque

Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS)
Supervisor: Prof. Dr. Guennadii Michailovich 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

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. n° 01/01895-4

Processo USP n° 2000.1.18222.1.6

Primeira Vigência: 1° maio de 2001 - 30 de abril de 2002

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

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

Dra. Thelma de Souza Berquó

Laboratório de Materiais Magnéticos (LMM)

Supervisora: Profa. Dra. Carmen Sílvia de Moya Partiti

Título do Projeto: Caracterização das Propriedades Magnéticas de Turfas do Médio Vale do Rio Paraíba do Sul, Estado de São Paulo: Uma Contribuição da Espectroscopia Mössbauer ao Estudo do Magnetismo Ambiental

Bolsa FAPESP - Proc. n° 00/06066-3

Processo USP n° 2000.1.27112.1.4

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

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

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

Dr. Walter Manuel Orellana Muñoz

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Supervisor: Prof. Dr. Adalberto Fazzio

Título do Projeto: Estudos de Processos em Si/SiO₂

Bolsa FAPESP - Proc. n° 00/00564-1

Processo USP n° 2000.1.9398.1.7

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

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

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

Dr. Wanderlã Luis Scopel

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Supervisor: Prof. Dr. Adalberto Fazzio

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

Bolsa FAPESP - Proc. n° 02/09226-7

Processo USP n° 2003.1.3570.1.5

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

Dr. Xavier Gratens

Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas (LESBT)

Supervisor: Prof. Dr. Valdir Bindilatti

Título do Projeto: New Investigations using Magnetization-Step Method

Bolsa FAPESP - Proc. n° 98/11522-6

Processo USP n° 1999.1.12394.1.4

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

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

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

Quarta Vigência: 1° de janeiro de 2002 - 31 de dezembro de 2002

Bolsa de Pós-Doutorado suspensa, no período de 1° 10.2002 a 30.11.2002. Reativada por mais três meses, a partir de 1° 12.2002.

Término da Vigência: 28 de fevereiro de 2003

2g - Doutorados:

Concluídos

“Estudo da Dinâmica de Caos no Gás Tridimensional de Elétrons de Alta Mobilidade”

Nilo Maurício Sotomayor Choque

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Guennadii Michailovich Gusev

Data: 12.09.2002

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

Pablo Guillermo Gonzales Ormeño

Fonte Financiadora: CNPq

Orientadora: Helena Maria Petrilli

Data: 24.10.2002

“Transições Metamagnéticas em Compostos R₆Fe_{14-x}Al_x (R = Terras-Raras): Propriedades Magnéticas e de Transporte”

Shintaro Jonen

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Hercílio Rodolfo Rechenberg

Data: 14.03.2002

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

Luis Eugênio Ramos
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: José Roberto Leite
Data: 10.09.2002

“Estudo da Transição Metal-Isolante em Óxidos de Terra-Rara e Niquel”

Márcia Tsuyama Escote
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Renato de Figueiredo Jardim
Data: 06.02.2002

Em Andamento

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

Frederico Dutilh Novaes
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Adalberto Fazzio

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

Gustavo Martini Dalpian
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Adalberto Fazzio

“Estados de Tamm em Super-Redes Semicondutoras Dopadas”

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

“Adsorção de O₂ 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

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

Denis Rezende de Jesus

Fonte Financiadora: CNPq

Orientadora: Carmen Silvia de Moya Partiti

“Análise dos Processos de Captura e Escape de Portadores na Região Ativa de Hetero-estruturas Contendo Pontos Quânticos”

Celso de Araújo Duarte

Fonte Financiadora: CNPq

Orientadora: Euzi Conceição Fernandes da Silva

“Transporte Quantitativo em Poços Parabólicos Largos”

Cássio Sanguini Sérgio

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Guennadii Michailovich Gusev

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

Adriano Manoel dos Santos

Fonte Financiadora: CAPES

Orientador: José Roberto Leite

“Propriedades de Poços Quânticos de AlGa_N/Ga_N”

Ângela Maria Ortiz de Zevallos Marquez

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: José Roberto Leite

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

David Gregório Pacheco Salazar

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: José Roberto Leite

“Magnetoóptica em Hetero-estruturas Semicondutoras”

Odille Cue Noriega

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Valmir Antônio Chitta

Co-orientador: José Roberto Leite

“Estudo Teórico de Processos de Inclusão de Moléculas Hóspedes em Alpha-Ciclodextrina em Solução Aquosa”

Herbert de Castro Georg

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientadora: Kaline Rabelo Coutinho

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

Frederico Ayres de Oliveira Neto

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientadora: Lucy Vitória Credidio Assali

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

Karina de Oliveira Barbosa

Fonte Financiadora: CNPq

Orientadora: Lucy Vitória Credidio Assali

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

Marcelo Marques

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientadora: Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

“Propriedades Intergranulares de Manganitas”

Alessandro de Souza Carneiro

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Renato de Figueiredo Jardim

“Estudo das Propriedades Intergranulares de Bi-2223”

Ernesto Govea Alcaide

Fonte Financiadora: CAPES

Orientador: Renato de Figueiredo Jardim

“Separação de Fases e Magnetorresistência em Manganitas”

José Antônio de Souza

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Renato de Figueiredo Jardim

“Estudos Teóricos das Interações Específicas entre Uréia-Água”

Eduardo Augusto Rissi

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

“Estudo de Propriedades Estruturais e Eletrônicas de Moléculas em Meio Líquido”

Eudes Eterno Fileti

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

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

Roberto Rivelino de Melo Moreno

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

“Espectroscopia de Biomoléculas em Meio Aquoso”

Valdemir Eneias Ludwig

Fonte Financiadora: CNPq

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

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

John Carlos Mantilla Uchoa

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Valdir Bindilatti

2h - Mestrados:

Concluídos

“Estudo Teórico da Autodifusão de Si e Ge na Liga Desordenada Si_{1-x}Ge_x”

Fábio Campos Poderoso

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Antônio José Roque da Silva

Data: 10.09.2002

“Estudo Teórico da Transição de Fase entre as Estruturas Diamante e β -TIN para a Liga Si_{1-x}Ge_x”

Renato Borges Pontes

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Antônio José Roque da Silva

Data: 12.09.2002

“Caracterização Magnética e Estrutural das Fases de Ferro em Sedimentos da Barragem de Taiapuê, São Paulo”

Daniel Ribeiro Franco

Fonte Financiadora: CNPq

Orientadora: Carmen Silvia de Moya Partiti

Data: 29.08.2003

“Processos de Recombinação em Pontos Quânticos em Amostras com Diferentes Espessuras de Camadas de InAs utilizando a Técnica de Fotoluminescência”

Celso de Araújo Duarte

Fonte Financiadora: CNPq

Orientador: Eliermes Arraes Meneses (IF-UNICAMP)

Co-Orientadora: Euzi Conceição Fernandes da Silva

Data: 07.05.2002

“Estudo Teórico da Estabilidade Estrutural e da Solvatação Hidrofílica da Alfa-Ciclodextrina”

Herbert de Castro Georg

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientadora: Kaline Rabelo Coutinho

Data: 12.07.2002

“Fotoluminescência de Filmes Epitaxiais de GaN Cúbico Intrínsecos e Dopados”

Ângela Maria Ortiz de Zevallos Marquez

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: José Roberto Leite

Data: 30.04.2002

“Controle Microestrutural e Magnetorresistência Intergranular em Manganitas $\text{La}_{0.7-x}\text{Y}_x\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ (0.0 e 0.1)”

José Antônio Souza

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Renato de Figueiredo Jardim

Data: 05.04.2002

“Modelagem Quântica de Inibidores Enzimáticos”

Daniel Rodrigo Ferreira Trzesniak

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

Data: 23.04.2002

“Estudos de Mudanças Conformacionais de Moléculas Flexíveis em Meio Solvente: Implementação em Simulação Monte Carlo e Aplicações”

Ivam Pereira Mendes Neto

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

Data: 18.12.2002

“Estudo Clássico-Quântico de Ligações de Hidrogênio em Meio Líquido: Piridina em Solução Aquosa”

Thaciana Valentina Malaspina Fileti

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

Data: 02.07.2002

“Interações de Troca entre Vizinhos Distantes por Degraus de Magnetização no $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ ”

Rafael Alejandro Cajacuri Merino

Fonte Financiadora: sem bolsa

Orientador: Valdir Bindilatti
Data: 06.03.2002

Em Andamento

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

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

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

Ferenc Diniz Kiss
Fonte Financiadora: CAPES
Orientador: Armando Corbani Ferraz

“Passivação em Compostos Semicondutores III-V”

Sandro Inácio de Souza
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Armando Corbani Ferraz

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

Ivan Ramos Pagnossin
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientadora: Euzi Conceição Fernandes da Silva

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

Sérgio Takimoto Maurício
Fonte Financiadora: Sem bolsa
Orientadora: Euzi Conceição Fernandes da Silva

“Superfícies Metálicas através de Cálculos Ab Initio”

Andrei Reyes Huamantínco
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientadora: Helena Maria Petrilli

“Interação de Quadrupolo Nuclear em Complexos envolvendo Metais”

Sandro Pereira Vilela
Fonte Financiadora: CNPq
Orientadora: Helena Maria Petrilli

“Propriedades Estruturais e Eletrônicas do Óxido SrTiO₃”

Joelson Cott Garcia

Fonte Financiadora: CAPES
Orientador: José Roberto Leite

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

Rolando Larico Mamani
Fonte Financiadora: CNPq
Orientadora: Lucy Vitória Credidio Assali

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

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

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

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

2i - Projetos de Iniciação Científica:

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

Leonardo N. Nóbrega
Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC
Orientador: Antônio Domingues dos Santos
Ano: 2002

“Análise Estrutural de Materiais Amorfos utilizando o Método de Monte Carlo Reverso”

Edwin Hobi Júnior
Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC
Orientadora: Antônio José Roque da Silva
Ano: 2002

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

Mariana Rossi Carvalho
Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC
Orientador: Antônio José Roque da Silva
Ano: 2002

“Desenvolvimento de um Viscômetro de Fio Vibrante para Medições de Ultras Baixas Temperaturas em Campos Magnéticos Super Intensos”

Marcelo Scolaro Morlotti
Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC
Orientador: Ewout ter Haar
Ano: 2002

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

Tiago Ezequiel Corrêa

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientador: Guennadii Michailovich Gusev

Ano: 2002

“Partículas Nanométricas de Ferritas preparadas por Encapsulamento Polimérico”

Ivanine Estrella Fachini Vieira

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientador: Hercílio Rodolfo Rechenberg

Ano: 2002

“Pontos Quânticos Auto-organizados em Ligas Semicondutoras”

Renato de Carvalho

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientador: José Roberto Leite

Ano: 2002

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

Rafael Dias Menezes

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientadora: Lucy Vitória Credidio Assali

Ano: 2002

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

Jefferson Gomes da Silva

Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC

Orientadora: Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Ano: 2002

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

Solange de Andrade

Fonte Financiadora: FAPESP

Orientador: Renato de Figueiredo Jardim

Ano: 2002

3 - ATIVIDADES DE EXTENSÃO E GESTÃO ACADÊMICA

3a - Atividades Administrativas Institucionais:

Adalberto Fazzio

Membro da Congregação do IFUSP.

Membro do Conselho do Departamento.

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

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

André Bohomoletz Henriques

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

Antônio Domingues dos Santos

Presidente da Comissão de Avaliação de Disciplinas do IFUSP.

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

Representante Suplente do DFMT junto à 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).

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

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

Armando Corbani Ferraz

Coordenador da Câmara de Avaliação da Pró-Reitoria de Pós-Graduação da USP (a partir de novembro de 2002).

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

Membro da Comissão de Avaliação da Pró-Reitoria de Pós-Graduação da USP (a partir de fevereiro de 2002).

Membro da Congregação do IFUSP.

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

Membro do Conselho do Departamento.

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

Presidente da Comissão de Pós-Graduação do IFUSP (mandato: de 09.12.2001 a 08.12.2003).

Suplente da Pró-Reitora de Pós-Graduação da USP (a partir de fevereiro de 2002).

Armando Paduan Filho

Representante do Departamento junto à Comissão de Consultorias e Convênios (mandato: de 25.03.2002 a 24.03.2004).

Membro da Congregação do IFUSP.

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

Carlos Castilla Becerra

Membro da Congregação do IFUSP.

Membro do Conselho do Departamento.

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

Carlos Henrique Westphal

Coordenador da Comissão de Avaliação de Disciplinas.

Membro da Congregação do IFUSP (mandato: de 30.05.2001 a 29.05.2003).

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

Carmen Silvia de Moya Partiti

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

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

Representante do Grupo de Espectroscopia Mössbauer junto à Comissão de Radioproteção do IFUSP, a partir de agosto de 1996, até o presente.

Representante do Instituto de Física da USP junto à Comissão Coordenadora do Curso de Licenciatura do Instituto de Matemática e Estatística da USP, a partir de março de 1998.

Euzi Conceição Fernandes da Silva

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

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

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

Ewout Ter Haar

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

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

Frank Patrick Missell

Membro da Congregação do IFUSP.

Membro do Conselho do Departamento.

Gerardo Fabián Goya

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

Guennadii Michailovich Gusev

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

Representante 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 Biblioteca do IFUSP (mandato: 29.06.2000 a 28.06.2002).

Helena Maria Petrilli

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

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

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

Representante Suplente do Departamento junto à Comissão de Consultorias e Convênios (mandato: de 25.03.2002 a 24.03.2004).

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

Hercílio Rodolfo Rechenberg

Chefe do Departamento (mandatos: de 23.02.2000 a 22.02.2002 e 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 (mandatos: de 23.02.2000 a 22.02.2002 e de 23.02.2002 a 22.02.2004).

José Roberto Leite

Membro da Congregação do IFUSP.

Membro do Conselho do Departamento.

Membro Titular da Academia Brasileira de Ciências.

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

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

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

Representante da Congregação do IFUSP junto ao Conselho Universitário (mandato: de 30.08.2001 a 31.08.2003).

Kazunori Watari

Coordenador da Sala Pró-Aluno do IFUSP.

Representante do Departamento junto à Comissão de Informática (mandato: 23.08.2001 a 22.08.2003).

Lucy Vitória Credidio Assali

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

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

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

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

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 03.03.2001 a 02.03.2003).
Membro da Congregação do IFUSP (mandato: de 31.05.2001 a 30.05.2003).

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

Coordenador do Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas.
Membro da Congregação do IFUSP.
Membro do Conselho do Departamento.
Suplente do Chefe do Departamento (mandatos: de 23.02.2000 a 22.02.2002 e de 23.02.2002 a 22.02.2004).

Renato de Figueiredo Jardim

Membro da Congregação do IFUSP (mandato: de 31.05.2001 a 30.05.2003).
Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 21.09.2001 a 20.09.2003).
Presidente da Comissão de Graduação (mandato: de 29.03.2003 a 28.03.2005).
Representante do Departamento junto à Comissão de Graduação do IFUSP (mandato: de 2002 a 2005).

Sylvio Roberto Accioly Canuto

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

Valdir Bindilatti

Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 21.09.2001 a 20.09.2003).
Membro Suplente da Congregação (mandato: de 30.05.2001 a 29.05.2003).
Representante Suplente do Departamento junto à Comissão de Informática do IFUSP (mandato: de 22.08.2001 a 21.08.2003).
Representante Suplente do Departamento junto à Comissão de Pesquisa do IFUSP (mandato: de 22.11.2001 a 21.11.2003).

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

Adalberto Fazzio

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, FAPERJ, FACEPE, CNPq e CAPES.
Atuação como Árbitro: Revista Brasileira de Física, Physical Review B + Physical Review Letter, Solid State Communications, International Journal Quantum Chemistry, Material Science Forum, Journal of Physics and Chemistry of Solids e Proceedings da Escola Brasileira de Semicondutores.

André Bohomoletz Henriques

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

Arbitragem Para: Journal of Applied Physics, Physica B, Thin Solid Films e Brazilian Journal of Physics.

Antônio Domingues dos Santos

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.

Antônio José Roque da Silva

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.

Arbitragem para: Brazilian Journal of Physics e International Journal of Modern Physics B.

Armando Corbani Ferraz

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

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

Armando Paduan Filho

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.

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

Carlos Castilla Becerra

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

Carmen Silvia Moya Partiti

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

Euzi Conceição Fernandes da Silva

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.

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

Ewout Ter Haar

Assessoria *ad hoc* prestada: CNPq.

Guennadii Michailovich Gusev

Assessoria científica prestada: FAPESP e CNPq.

Consultoria para: Physical Review B.

Helena Maria Petrilli

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

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

Hercílio Rodolfo Rechenberg

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

Gerardo Fabián Goya

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP.

Arbitragem para: Physica B, Journal of Magnetism and Magnetic Materials - JMMM, Physica Status Solidi, Journal of Solid State Chemistry, Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials, Material Science Fórum, Brazilian Journal of Physics e Materials Letters.

José Roberto Leite

Assessoria científica prestada: FAPESP, CAPES, CNPq, FAPERJ, FAPEMIG, FINEP, FUEL, FAPERGS, FAPEAL, UNICAMP, UFRGS, Secretaria da Ciência, Tecnologia e Desenvolvimento Econômico do Estado de São Paulo e MCT.

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

Consultorias para revistas nacionais e internacionais na área da Física: Physical Review, Physical Review Letters, Solid State Commun., Applied Physics Letters, Modern Physics Letters B, International Journal of Modern Physics B, Brazilian Journal of Physics, Physica Status Solidi, Revista Estudos Arte/Tecnologia (PUC/GO), etc.

Lucy Vitória Credidio Assali

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.

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

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.

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

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

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

Renato de Figueiredo Jardim

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

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

Sonia Frota-Pessôa

Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.

Arbitragem para: Physical Review B e Physical Review Letters.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

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

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

Valdir Bindilatti

Assessoria prestada: FAPESP e CNPq.

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

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

Adalberto Fazzio

“Dispositivos Moleculares: A Big-Ciência da Nano-Física” - Curso Geral ministrado nos dias 04, 05 e 06 de fevereiro de 2002 - “Curso de Verão - IFUSP’2002”, Universidade de São Paulo - USP, Instituto de Física, São Paulo, SP (28 de janeiro a 06 de fevereiro de 2002).

“Adsorção e Dopagem de Nanotubos de Carbono” - Seminário, Universidade de São Paulo - USP, Instituto de Física, Departamento de Física Aplicada, Laboratório de Cristalografia, São Paulo, SP (18 de abril de 2002).

“Simulação Computacional: Nanotubos de Carbono e Nanofios de Ouro” - Colóquio, Universidade de São Paulo - USP, Instituto de Física de São Carlos, São Carlos, SP (21 de junho de 2002).

“Nanoeletrônica: em que os Físicos Podem Contribuir (se o governo não atrapalhar)”- Mini-Colóquio da Graduação, Universidade de São Paulo - USP, Instituto de Física, São Paulo, SP (26 de agosto de 2002).

“Simulações Computacionais em Materiais: Nanotubos de Carbono e Nanofios de Ouro” - Colóquio, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF, Rio de Janeiro, RJ (19 de setembro de 2002).

“Nanoeletrônica: em que os físicos podem contribuir” - Colóquio, Universidade Federal de Itajubá - UNIFEI, Instituto de Ciências, Itajubá, MG (03 de outubro de 2002).

“Simulação Computacional em Materiais: Nanofios de Ouro” - Seminário, Universidade Federal de Itajubá - UNIFEI, Instituto de Ciências, Itajubá, MG (04 de outubro de 2002).

“A Eletrônica no Século XXI” - Palestra de Abertura da Jornada Científica da Universidade de Ijuí, Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul - UNIJUÍ, Ijuí, RS (04 de novembro de 2002).

“Nanofios de Ouro” - Seminário, Universidade Federal de Santa Maria - UFSM, Departamento de Física, Santa Maria, RS (novembro de 2002).

“Nanofios de Ouro” - Colóquio, Universidade Federal de Goiás - UFGO, Instituto de Física, Goiânia, GO (novembro de 2002).

“Influência do Grau de Liberdade do Spin na Oxidação Si/SiO₂” - Seminário, Universidade Federal da Bahia - UFBA, Instituto de Física, Salvador, BA (dezembro de 2002).

André Bohomoletz Henriques

“Screened Interactions in Doped Superlattices” - Heriot-Watt University, Department of Physics, Edimburgo, Reino Unido (24 de outubro de 2002).

Antônio José Roque da Silva

“Métodos de Simulação em Matéria Condensada” - Seminário, Universidade de São Paulo - USP, Ribeirão Preto, SP (06 de abril de 2002).

“Simulações Computacionais em Materiais: de Nanotubos a Nanofios” - Colóquio, Universidade de São Paulo -USP, Instituto de Física, São Paulo, SP (20 de junho de 2002).

“Simulações Computacionais em Materiais: Efeitos de Spin em Reações em SiO₂ e de Impurezas em Nanofios de Au” - Seminário - Universidade Federal Fluminense - UFF, Instituto de Física, Niterói, RJ (outubro de 2002).

Gerardo Fabián Goya

“Principles of Mössbauer Spectroscopy, and Applications to Magnetism in Nanostructured Materials” - Invited talk, Institut für Neue Materialien, Saarbrücken, Alemanha (setembro de 2002).

“Magnetic Dynamics of Ferromagnetic Single-Domain Particles” - Invited talk - Reunião Anual do SFB (Sonderforschungsbereich-277), Deutschen Forschungsgemeinschaft (German Science Foundation), Orscholz, Alemanha (outubro de 2002).

Guennadii Michailovich Gusev

“Magnotransport of a Quasi-Three-Dimensional Electron Gas in the Lowest Landau Level” - Invited talk - “15th International Conference on High Magnetic Field in Semiconductor Physics”, Oxford, Inglaterra (de 05 a 09 de agosto de 2002).

“Quasiclassical Negative Magnetoresistance of a Two-Dimensional Electron Gas in a Spatially Random Magnetic Field” Apresentação Oral - “26th International Conference on the Physics of Semiconductors”, Edinburgh, Escócia (de 29 de Julho a 02 de agosto de 2002).

“Quantum Hall Ferromagnet in Parabolic Well” - Seminário, High Magnetic Field Laboratory, Grenoble, França (15 de dezembro de 2002).

Helena Maria Petrilli

“Electronic Properties: Calculations in Condensed Matter Physics” - Seminários, Universidade de La Plata, Departamento de Física, La Plata, Argentina (de 17 e 18 de dezembro de 2002).

José Roberto Leite

“Science & Societé” Cendotec/CNRS - Mesa-Redonda, IPEN, São Paulo, SP (de 28 de fevereiro a 1^o de março de 2002).

“Encontro de Estudantes de Física” - Mesa-Redonda, Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, Rio de Janeiro, RJ (16 de maio de 2002).

“Diodos Emissores de Luz Azul: Um Fantástico Avanço da Física e da Tecnologia de Semicondutores” - Colóquio, Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP (20 de junho de 2002).

“Semana de Pós-Graduação” - Palestra, Universidade Federal Fluminense - UFF, Instituto de Física - UFRJ, Rio de Janeiro, RJ (28 de agosto de 2002).

“Novas Tecnologias e Impacto Social” - Mesa-Redonda, Universidade de São Paulo - USP, Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Ribeirão Preto, SP (30 de agosto de 2002).

“O Impacto das Recentes Descobertas em Nanoestruturas Semicondutoras sobre o Mercado da Eletrônica e Optoeletrônica” - Seminário, Instituto de Pesquisas Tecnológicas - IPT, São Paulo, SP (23 de outubro de 2002).

“Nanotecnologia, a Revolução Industrial do Século XXI” - Colóquio, Instituto de Física Teórica - IFT, UNESP, São Paulo, SP (20 de novembro de 2002).

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

“Propriedades Físicas de Ligas Ternárias e Quaternárias envolvendo os Nitretos do Grupo-III” - Seminário, Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, Instituto de Física Gleb Wataghin, Departamento de Física da Matéria Condensada, Campinas, SP (22 de setembro de 2002).

Nei Fernandes de Oliveira Junior

“Uma antena Gravitacional Brasileira” - Colóquio, Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Instituto de Física, Porto Alegre, RS (26 de março de 2002).

Renato de Figueiredo Jardim

“Propriedades de Supercondutividade em Óxidos” - Colóquio, Faculdade de Engenharia Química, Departamento de Ciência dos Materiais, Lorena, SP (17 e 18 de abril de 2002).

“Supercondutividade em Sistemas Óxidos” - Colóquio, Universidade Federal de São Carlos - UFSCar, Departamento de Química, São Carlos, SP (17 e 18 de maio de 2002).

“Novos Materiais Supercondutores” - Palestra Convidada, VI Escola Brasileira de Supercondutividade, Caxambu, MG (maio de 2002).

“Magnetorresistência Colossal em Manganitas” - Colóquio, Universidade de São Paulo - USP, Faculdade de Filosofia de Ciências e Letras, Ribeirão Preto, SP (24 e 25 de maio de 2002).

“Metal Insulator Transition in $RNiO_3$ and Related Solid Solutions” - Palestra Convidada, First Meeting of the Sociedade Brasileira de Pesquisa em Materiais - SBPMat., Rio de Janeiro, RJ (de 07 a 10 de julho de 2002).

Sylvio Roberto Accioly Canuto

“Estudos de Moléculas em Meio Líquido” - Colóquio, Universidade de Lisboa, Faculdade de Ciências, Centro de Física da Matéria Condensada, Lisboa, Portugal (22 de janeiro de 2002).

“Quantum Chemistry of Molecules in Solution” - Seminário, Université Henri-Poincaré, Nancy, França (14 de março de 2002).

“Molecules in the Liquid Environment” - Palestra “M.N. Saha Memorial Lecture” - Indian Association for the Cultivation of Sciences, Calcutá, Índia (18 de março de 2002).

“Monte Carlo-Quantum Mechanics Studies of Molecules in Solution” - Palestra Plenária Convidada, International Conference on “Current Developments in Atomic, Molecular and Chemical Physics”, New Delhi, Índia (21 de março de 2002).

“Moléculas em Meio Líquido” - Seminário, Universidade de São Paulo - USP, Instituto de Física, Departamento de Física Aplicada, Laboratório de Cristalografia, São Paulo, SP (16 de maio de 2002).

“Hydrogen Bonds in Explicit Liquid Environment Using a Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Methodology” - Palestra Plenária Convidada - “XXVIII Congresso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (Quitel 2002), Montevideo, Uruguai (setembro de 2002).

“Moléculas em Meio Líquido” - Colóquio, Universidade de São Paulo - USP, Instituto de Física, São Carlos, SP (27 de setembro de 2002).

“Simulação Computacional de Moléculas e Biomoléculas” - Mini-Colóquio da Graduação, Universidade de São Paulo - USP, Instituto de Física, São Paulo, SP (09 de outubro de 2002).

“Theoretical Studies of the Spectroscopic Properties of Molecules in Solution. Solvents as Explicit Liquids” - Palestra Convidada - Workshop New Concepts and Applications of Physical Organic Chemistry, Universidade Federal Fluminense - UFF, Instituto de Química, Niterói, RJ (outubro de 2002).

“Ligações de Hidrogênio e Propriedades de Meio Aquoso” - Colóquio - Universidade Federal Fluminense - UFF, Instituto de Física, Niterói, RJ (26 de novembro de 2002).

“Ligações de Hidrogênio e Propriedades de Meio Aquoso” - Colóquio, Universidade Federal de Alagoas - UFAL, Departamento de Física, Maceió, AL (04 de novembro de 2002).

“Contribuição das Ligações de Hidrogênio no Equilíbrio Conformacional do Furfural em Água” - Colóquio, Universidade Federal de Pernambuco - UFPE, Departamento de Química Fundamental, Recife, PE (novembro de 2002).

“Simulação Computacional de Moléculas em Meio Líquido” - Colóquio, Universidade Federal de Pernambuco - UFPE, Departamento de Física, Recife, PE (novembro de 2002).

3d - Participação em Comissões Julgadoras no IFUSP:

Adalberto Fazio

Márcia Tsuyama Escote (Tese de Doutorado).

Título: “Estudo da Transição Metal-Isolante em Óxidos de Terra-Rara e Níquel”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazio (IFUSP), Élon Longo da Silva (UFSCAR), Jose Arana Varela (IQ-UNESP) e Reginal Muccillo (IPEN) e Renato de Figueiredo Jardim (orientador) (IFUSP).

Data: 06 de fevereiro de 2002.

Wanderlã Luis Scopel (Tese de Doutorado).

Título: “Estudo das Propriedades Químicas, Morfológicas e Estruturais de Oxinitreto de Silício Depositado por PECVD”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), Lucy Vitória Credidio Assali (IFUSP), Marcelo Nelson Paez Carrenõ (EPUSP), Márcia Carvalho de Abreu Fantini (orientadora) (IFUSP) e Valmor Roberto Mastelaro (IFSCar-USP).

Data: 12 de agosto de 2002.

Pablo Guillermo Gonzáles Ormeño (Tese de Doutorado).

Título: “Determinação dos Diagramas de Fases do Sistema Fe-Al-Mo Cúbico de Corpo Centrado por Cálculos de Primeiros Princípios”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), Affonso Augusto Guidão Gomes (CBPF), Ferdinando Luiz Cavallante (EPUSP), Helena Maria Petrilli (orientadora) (IFUSP) e Roberto Ribeiro de Avillez (PUC-RJ).

Data: 24 de outubro de 2002.

Antônio Domingues dos Santos

José Antônio Souza (Dissertação de Mestrado)

Título: “Controle Microestrutural e Magnetorresistência Intergranular em Manganitas $\text{La}_{0.7x}\text{Y}_x\text{Ca}_{0.3}\text{O}_{3+x}$; $x = 0.0$ e 0.1 ”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Domingues dos Santos (IFUSP), Edson Roberto Leite (UFSCAR) e Renato de Figueiredo Jardim (orientador) (IFUSP).

Data: 05 de abril de 2002.

Ricardo Alexander Castro Pinto (Dissertação de Mestrado).

Título: “Caracterização de Filmes Finos de Nitreto de Carbono Produzidos por RF Magnetron Sputtering Reativo”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Domingues dos Santos, Luiz da Silva Zambom (EPUSP) e Masao Matsuoka (orientador) (IFUSP).

Data: 18 de outubro de 2002.

Antônio José Roque da Silva

Fábio Campos Poderoso (Dissertação de Mestrado).

Título: “Estudo Teórico da Autodifusão de Si e Ge na Liga Desordenada $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio José Roque da Silva (orientador) (IFUSP), Maria Cecília Barbosa da Silveira Salvadori (IFUSP) e Rodrigo Barbosa Capaz (UFRJ).

Data: 10 de setembro de 2002.

Renato Borges Pontes (Dissertação de Mestrado).

Título: “Estudo Teórico da Transição de Fase entre as Estruturas Diamante e b-TIN para Liga $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio José Roque da Silva (orientador) (IFUSP), Edison Zacarias da Silva (UNICAMP) e Márcia Carvalho de Abreu Fantini (IFUSP).

Data: 12 de setembro de 2002.

Armando Corbani Ferraz

Sandro Martini (Tese de Doutorado).

Título: “Estudo da Segregação do Índio em Camadas Epitaxiais de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Crescidas Sobre Substratos de $\text{GaAs}(001)$ ”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Alain André Quivy (orientador) (IFUSP), Armando Corbani Ferraz (IFUSP), Márcia Carvalho de Abreu Fantini (IFUSP), Patrícia Lustoza de Souza (PUC-RJ) e Wagner Nunes Rodrigues (UFMG).

Data: 30 de abril de 2002.

Luis Eugênio Ramos (Tese de Doutorado).

Título: “Impurezas e Defeitos Nativos em Nitretos do Grupo III Cúbicos”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. José Roberto Leite (orientador) (IFUSP), Armando Corbani Ferraz (IFUSP), Eduardo Abramof (INPE), Ivan Costa da Cunha Lima (UERJ), José Roberto Leite (orientador) (IFUSP) e Tomé Mauro Schmidt (UFU).

Data: 10 de setembro de 2002.

Carlos Castilla Becerra

Shintaro Jonen (Tese de Doutorado).

Título: “Estudo das Transições Metamagnéticas em Compostos Intermetálicos $\text{R}_6\text{Fe}_{14-x}\text{Al}_x$ ($\text{R}=\text{Nd}, \text{La}$)”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Alberto Passos Guimarães Filho (CBPF), Carlos Castilla Becerra (IFUSP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (orientador) (IFUSP), João Edgar Schmidt (UFRGS) e Paulo Henrique Porchetto Domingues (UFRJ).

Data: 14 de março de 2002.

André de Pinho Vieira (Tese de Doutorado).

Título: “Efeitos de Desordem ou Aperiocidade sobre o Comportamento de Sistemas Magnéticos”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Silvio Roberto de Azevedo Salinas (orientador) (IFUSP), Carlos Castilla Becerra (IFUSP), Eduardo Miranda (UNICAMP), Francisco Castilho Alcaraz (IFSCar-USP) e Lindberg Lima Gonçalves (UFC).

Data: 04 de outubro de 2002.

Carmen Silvia de Moya Partiti

Daniel Ribeiro Franco (Dissertação de Mestrado).

Título: “Caracterização Magnética e Estrutural das Fases de Ferro em Sedimentos da Barragem de Taiapuêba, São Paulo”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Carmen Silvia de Moya Partiti (orientadora) (IFUSP), Maristela Olzon Dionízio (UFSCar) e Paulo Eduardo Artaxo Netto (IFUSP).

Data: 29 de agosto de 2002.

Guennadii Michailovich Gusev

Nilo Mauricio Sotomayor Choque

Título: “Estudo da Dinâmica de Caos no Gás Tridimensional de Elétrons de Alta Mobilidade”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Caio Henrique Lewenkopf (UERJ), Fernando Likawa (UNICAMP), Guennadii Michailovich Goussev (orientador) (IFUSP), Iberê Luiz Caldas (IFUSP) e Peter Alexander Bleinroth Schulz (UNICAMP).

Data: 12 de setembro de 2002.

Helena Maria Petrilli

Pablo Guillermo Gonzáles Ormeño (Tese de Doutorado).

“Determinação dos Diagramas de Fases do Sistema Fe-Al-Mo Cúbico de Corpo Centrado por Cálculos de Primeiros Princípios”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), Affonso Augusto Guidão Gomes (CBPF), Ferdinando Luiz Cavallante (EPUSP), Helena Maria Petrilli (orientadora) (IFUSP) e Roberto Ribeiro de Avillez (PUC-RJ).

Data: 24 de outubro de 2002.

Hercílio Rodolfo Rechenberg

Rafael Alejandro Cajacuri Merino (Dissertação de Mestrado).

Título: “Interações de Troca de Vizinhos Distantes por Degraus de Magnetização no $Cd_{1-x}Mn_xSe$ ”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP), Valdir Bindilatti (orientador) (IFUSP) e Ulisses de Azevedo Leitão (UFMG).

Data: 06 de março de 2002.

Shintaro Jonen (Tese de Doutorado).

Título: “Estudo das Transições Metamagnéticas em Compostos Intermetálicos $R_6Fe_{14-x}Al_x$ ($R=Nd, La$)”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Alberto Passos Guimarães Filho (CBPF), Carlos Castilla Becerra (IFUSP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (orientador) (IFUSP), João Edgar Schmidt (UFRGS) e Paulo Henrique Porchetto Domingues (UFRJ).

Data: 14 de março de 2002.

José Roberto Leite

Marcelo Martinelli (Tese de Doutorado).

Título: “Compressão de Ruído Quântico e Efeitos Transversos em Osciladores Paramétricos Óticos”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Zelaquett Khoury (UFF), Carlos Henrique de Brito Cruz (IF-UNICAMP), Carlos Henrique Monken (UFMG), José Roberto Leite (IFUSP) e Paulo Alberto Nussenzveig (orientador) (IFUSP).

Data: 26 de fevereiro de 2002.

Ângela Maria Ortiz de Zevallos Márquez (Dissertação de Mestrado).

Título: “Fotoluminescência de Filmes Epitaxiais de GaN Cúbico Intrínsecos e Dopados”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Yukio Ueta (INPE), Horácio Wagner Leite Alves (FUNREI) e José Roberto Leite (orientador) (IFUSP).

Data: 30 de abril de 2002.

Luis Eugênio Ramos (Tese de Doutorado).

Título: “Impurezas e Defeitos Nativos em Nitretos do Grupo III Cúbicos”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. José Roberto Leite (orientador) (IFUSP), Armando Corbani Ferraz (IFUSP), Eduardo Abramof (INPE), Ivan Costa da Cunha Lima (UERJ), José Roberto Leite (orientador) (IFUSP) e Tomé Mauro Schmidt (UFU).

Data: 10 de setembro de 2002.

Lucy Vitória Credidio Assali

Celso de Araújo Duarte (Dissertação de Mestrado).

Título: “Processos de Recombinação em Pontos Quânticos em Amostras com Diferentes Espessuras de Camadas de InAs utilizando a Técnica de Fotoluminescência”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Eliermes Arraes Meneses (orientador) (IF-UNICAMP), José Brás Barreto de Oliveira (UNESP) e Lucy Vitoria Credidio Assali (IFUSP).

Data: 07 de maio de 2002.

Wanderlã Luis Scopel (Tese de Doutorado).

Título: “Estudo das Propriedades Químicas, Morfológicas e Estruturais de Oxinitreto de Silício Depositado por PECVD”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), Lucy Vitória Credidio Assali (IFUSP), Marcelo Nelson Paez Carrenõ (EPUSP), Márcia Carvalho de Abreu Fantini (orientadora) (IFUSP) e Valmor Roberto Mastelaro (IFSCar-USP).

Data: 12 de agosto de 2002.

Renato de Figueiredo Jardim

Márcia Tsuyama Escote (Tese de Doutorado).

Título: “Estudo da Transição Metal-Isolante em Óxidos de Terra-Rara e Ni”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), Élon Longo da Silva ((UFSCAR), Jose Arana Varela (IQ-UNESP) e Reginal Muccillo (IPEN) e Renato de Figueiredo Jardim (orientador) (IFUSP).

Data: 06 de fevereiro de 2002

José Antônio Souza (Dissertação de Mestrado).

Título: “Controle Microestrutural e Magnetorresistência Intergranular em Manganitas $\text{La}_{0,7-x}\text{Y}_x\text{Ca}_{0,3}\text{MnO}_3$ ($0.0 \leq x \leq 0.5$)”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Domingues dos Santos (IFUSP) e Edson Roberto Leite (UFSCAR) e Renato de Figueiredo Jardim (orientador) (IFUSP).

Data: 05 de abril de 2002.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Daniel Rodrigo Ferreira Trzesniak (Dissertação de Mestrado).

Título: “Modelagem Quântica de Inibidores Enzimáticos”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Hélio Chacham (UFMG), Rogério Custódio (UNICAMP) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (orientador) (IFUSP).

Data: 23 de abril de 2002.

Thaciana Valentina Malaspina Fileti (Dissertação de Mestrado).

Título: “Estudo Clássico-Quântico de Ligações de Hidrogênio em Meio Líquido: Piridina em Solução Aquosa”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Marcos Antônio de Castro (UFGo), Sylvio Roberto Accioly Canuto (orientador) (IFUSP) e Vera Bohomoletz Henriques (IFUSP).

Data: 02 de julho de 2002.

Nara Cristina Guisoni (Tese de Doutorado).

Título: “Polimorfismo Líquido e Efeito Hidrofóbico Por meio de Modelos Simplificados”

Comissão Examinadora: Profs. Drs. João Antônio Plascak (UFMG), Mário José de Oliveira (IFUSP), Vera Bohomoletz Henriques (orientadora) (IFUSP), Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP) e Wagner Figueiredo (UFSC).

Data: 13 de dezembro de 2002.

Ivam Pereira Mendes Neto (Dissertação de Mestrado).

Título: "Estudos de Mudanças Conformacionais de Moléculas Flexíveis em Meio Solvente: Implementação em Simulação Monte Carlo e Aplicações”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Alex Antonelli (UNICAMP), Sylvio Roberto Accioly Canuto (orientador) (IFUSP) e Vera Bohomoletz Henriques (IFUSP).

Data: 18 de dezembro de 2002.

Valdir Bindilatti

Rafael Alejandro Cajacuri Merino (Dissertação de Mestrado).

Título: “Interações de Troca de Vizinhos Distantes por Degraus de Magnetização no $Cd_{1-x}Mn_xSe$ ”.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP), Valdir Bindilatti (orientador) (IFUSP) e Ulisses de Azevedo Leitão (UFMG).

Data: 06 de março de 2002.

3e - Participação em Comissões Julgadoras em outras Instituições:

Adalberto Fazzio

Concurso para o Provimento de um Cargo de Professor Adjunto.

Universidade Federal Fluminense - UFF, Instituto de Física, Rio de Janeiro, RJ.

Período: de 08 a 11 de abril de 2002.

Tese de Doutorado de Varlei Rodrigues .

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP.

Data: 25 de abril de 2002.

Concurso de Livre-Docência.

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

Período: de 17 a 19 de junho de 2002.

Tese de Doutorado de Cássio Stein Moura.

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

Data: 27 de junho de 2002.

Tese de Doutorado de Marcelo Ferreira da Silva

Universidade de São Paulo - USP, Instituto de Física de São Carlos, São Carlos, SP.

Data: 16 de agosto de 2002.

Concurso de Livre Docência.

Universidade Estadual Paulista - UNESP, Faculdade de Ciências, Departamento de Física, Bauru, SP.

Período: de 17 a 18 de outubro de 2002.

Concurso Público para o Provimento de um Cargo de Professor Adjunto.

Universidade Federal de Goiás - UFGO, Instituto de Física, Goiânia, Go.

Período: de 16 a 20 de novembro de 2002.

Dissertação de Mestrado de Hélio Tsuzuki.

Universidade Federal da Bahia - UFBA, Instituto de Física, Salvador, BA.

Data: 05 de dezembro de 2002.

Antônio Domingues dos Santos

Tese de Doutorado de Kleber Roberto Pirota.

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP.

Data: 25 de janeiro de 2002.

Tese de Doutorado de Alberto Einstein Pereira de Araújo.

Universidade Federal de Pernambuco - UFPE, Departamento de Física, Recife, PE.

Data: 21 de março de 2002.

Antônio José Roque da Silva

Tese de Doutorado de Varlei Rodrigues.

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP.

Data: 25 de abril de 2002.

Tese de Doutorado de Neemias Alves de Lima.

Universidade de São Paulo - USP, Instituto de Física de São Carlos, São Carlos, SP.

Data: 26 de abril de 2002.

Tese de Doutorado de Rafael Tristão Pepinos.

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP.

Data: 12 de setembro de 2002.

Gerardo Fabián Goya

Tese de Doutorado de Márcia Cristina Vilchenski.

Universidade Estadual Paulista - UNESP, Instituto de Química, Araraquara, SP.

Data: 1º de abril de 2002.

Helena Maria Petrilli

Dissertação de Mestrado de Antônio Carlos Ferreira Seridônio.

Universidade de São Paulo - USP, Instituto de Física de São Carlos, São Carlos, SP.

Data: 05 de abril 2002

Dissertação de Mestrado de Alexandre Abdalla Araújo.

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP.

Data: 23 de julho 2002

Tese de Doutorado de Leonardo A. Errico.

Universidade Nacional de La Plata, Faculdade de Ciências, La Plata, Argentina.

Data: 17 de dezembro de 2002.

Hercílio Rodolfo Rechenberg

Exame de Qualificação de Doutorado de Laudemir Carlos Varanda.

Universidade Estadual Paulista - UNESP, Instituto de Química, Araraquara, SP.

Data: 27 de novembro de 2002.

Exame de Qualificação de Doutorado de Marcelo Henrique Sousa.

Universidade de Brasília - UnB, Instituto de Física, Brasília, DF.

Data: 13 de dezembro de 2002.

José Roberto Leite

Tese de Doutorado de Simone Camargo Trippe.

Universidade de São Paulo - USP, Escola Politécnica, São Paulo, SP.

Data: 31 de janeiro de 2002.

Concurso de Livre Docência.

Universidade de São Paulo - USP, Escola Politécnica, São Paulo, SP.

Período: de 17 a 19 de junho de 2002.

Banca Julgadora para premiação do melhor trabalho apresentado no Seminário de Iniciação Científica do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE.
Consultor Externo CNPq de avaliação do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE.
São José dos Campos, SP.
Período de 10 a 12 de junho de 2002.

Concurso Público para o Provimento de um Cargo de Professor Adjunto.
Universidade de Brasília - UnB, Instituto de Física, Brasília, DF.
Período: 08 a 12 de abril de 2002.

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Dissertação de Mestrado de Marcello Mendes Hasegawa.
Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA, São José dos Campos, SP.
Data: 17 de dezembro de 2002.

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

Tese de Doutorado de José Luiz de Melo.
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE, São José dos Campos, SP.
Data: 21 de março de 2002.

Tese de Doutorado de Afonso Gomes.
Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Instituto de Física, Porto Alegre, RS.
Data: 25 de março de 2002.

Concurso Público para o Provimento de um Cargo de Professor Adjunto.
Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, Departamento de Física dos Sólidos, Rio de Janeiro, RJ.
Período de 23 a 27 de abril de 2002.

Renato de Figueiredo Jardim

Dissertação de Mestrado de Clécio Leão da Silva Lima.
Universidade Federal de Pernambuco - UFPE, Recife, PE.
Período: de 1º a 02 de março de 2002.

Tese de Doutorado de Goran Brankovic.
Universidade Estadual Paulista - UNESP, Instituto de Química, Araraquara, SP.
Data: 24 de abril de 2002.

Tese de Doutorado de José Henrique Spahn Torres.
Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP.
Período: agosto de 2002.

Tese de Doutorado de Daniel Rojas Pupo.

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP.

Período: setembro de 2002.

Concurso de Livre Docência do Prof. Dr. Carlos Roberto Grandini.

Universidade Estadual Paulista - UNESP, Faculdade de Ciências, Departamento de Física, Bauru, SP.

Período: outubro de 2002.

Concurso de Livre Docência do Prof. Dr. Luis Vicente de Andrade Scalvi.

Universidade Estadual Paulista - UNESP, Faculdade de Ciências, Departamento de Física, Bauru, SP.

Período: outubro de 2002.

Tese de Doutorado de Mauricio da Silva Sercheli.

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP.

Data: 12 de dezembro de 2002.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Dissertação de Mestrado de Paulo Henrique Ribeiro Peixoto.

Universidade Federal de Pernambuco - UFPE, Departamento de Física, Recife, PE.

Data: 1º de abril de 2002.

Tese de Doutorado de Neemias Alves de Lima.

Universidade de São Paulo - USP, Instituto de Física de São Carlos, São Carlos, SP.

Data: 26 de abril de 2002.

Tese de Doutorado de Marcelo Ferreira da Silva.

Universidade de São Paulo - USP, Instituto de Física de São Carlos, São Carlos, SP.

Data: 16 de agosto de 2002.

Tese de Doutorado de José Paulo D’Incao.

Universidade de São Paulo - USP, Instituto de Física de São Carlos, São Carlos, SP.

Data: 26 de agosto de 2002.

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

Adalberto Fazzio

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).

Membro do Comitê Organizador da 20th International Conference on Amorphous and Microcrystalline Semiconductors - ICAMS-20, Campos do Jordão, SP (de 24 a 29 de agosto de 2003).

Coordenador Geral do XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambu, MG (de 06 a 10 de maio de 2003).

Antônio José Roque da Silva

Coordenador Geral do Curso de Verão IFUSP'2002, São Paulo, SP (de 28 de janeiro a 06 de fevereiro de 2002).

Helena Maria Petrilli

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

José Roberto Leite

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

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

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

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

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

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

Renato de Figueiredo Jardim

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

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

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

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

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

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

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

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Editor Associado do *Brazilian Journal of Physics*.

Membro do Corpo Editorial da *Computer Physics Communications*.

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

Membro da Comissão do Grupo de Trabalho de Físicos do Ministério da Ciência e Tecnologia (2002).

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

Membro do Comitê Externo de Avaliação do Programa de Iniciação Científica (Programa PIBIC do CNPq) da Universidade de Moji das Cruzes - UMC.

Membro Titular do Conselho da Sociedade Brasileira de Física.

Presidente do Comitê Assessor de Física/Astronomia do CNPq (de julho de 2001 a julho de 2002).

4 - ATIVIDADES DE PESQUISA

4a - Grupos de Pesquisa:

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Docentes:

Adalberto Fazzio

Antônio José Roque da Silva

Armando Corbani Ferraz

Helena Maria Petrilli

Kazunori Watari

Lucy Vitória Credidio Assali

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Pós-Doutorandos:

Cesar Renato Simenes da Silva (FAPESP)

Fernando de León-Pérez (FAPESP)

Pedro Paulo de Mello Venezuela (FAPESP)

Puspitapallab Chaudhuri (FAPESP)

Ronei Miotto (FAPESP)

Walter Manuel Orellana Muñoz (FAPESP)

Doutorandos:

Eduardo Augusto Rissi (FAPESP)
Eudes Eterno Fileti (FAPESP)
Frederico Ayres de Oliveira Neto (FAPESP)
Frederico Dutilh Novaes (CNPq)
Gustavo Martini Dalpian (FAPESP)
Ivana Zanella da Silva (CNPq)
Karina de Oliveira Barbosa (CNPq)
Pablo Guillermo Gonzales Ormeño (CNPq)
Renato Borges Pontes (FAPESP)
Roberto Rivelino de Melo Moreno (CNPq)
Valdemir Eneias Ludwig (FAPESP)

Mestrandos:

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

Iniciação Científica:

Alexandre Martins Melo (CNPq/PIBIC)
Edwin Hobi Júnior (CNPq/PIBIC)
Ferenc Diniz Kiss (CNPq/PIBIC)
Mariana Rossi Carvalho (CNPq/PIBIC)
Rafael Dias Menezes (CNPq/PIBIC)

Colaboradoras Permanentes:

Kaline Rabelo Coutinho (Universidade de Moji das Cruzes - UMC, Moji das Cruzes, SP).
Sonia Frota-Pessôa (Docente Aposentada - IFUSP).
Wanda Valle Marcondes Machado (Docente Aposentada - IFUSP).

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:

Prof. Dr. Alex Antonelli (Universidade Estadual de Campinas, SP). Visitas curtas.
Profa. Dra. Ângela Burlamaqui Klautau (Universidade Federal do Pará, Pa, Belém). Visitas curtas.
Prof. Dr. Armando J. T. das Neves (Departamento de Física da Universidade de Aveiro, Portugal).

Prof. Dr. Douglas Soares Galvão (Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP). Visitas curtas.

Prof. Dr. Edison Zacarias da Silva (Universidade Estadual de Campinas, SP). Visitas curtas.

Prof. Dr. Eduardo Kojy Takahashi (Universidade Federal de Uberlândia). Período: de 01.09.2001 a 31.01.2002.

Prof. Dr. Fernando de Brito Mota (Universidade Federal da Bahia, Salvador, BA). Visitas curtas.

Prof. Dr. José David Mangueira Vianna (Universidade de Brasília, Brasília, DF). Visitas curtas.

Prof. Dr. Mauro dos Santos de Carvalho (Universidade Federal de Lavras, MG). Visitas curtas.

Prof. Dr. Pedro Paulo de Mello Venezuela (Universidade Federal Fluminense, Niterói, RJ). Visitas curtas.

Prof. Dr. Roberto Hiroki Miwa (Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG). Visitas curtas.

Prof. Dr. Rogério J. Baierle (Centro Universitário Franciscano/CEUNIFRAN, Santa Maria, RS). Visitas curtas.

Prof. Dr. Ronaldo Mota (Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, RS). Visitas curtas.

Prof. Dr. Ronei Miotto (Universidade de Brasília, DF). Visitas curtas.

Profa. Dra. Rosa di Felice (Universidade de Módena, Itália). Período: de 29.11 a 23.12.2002.

Prof. Dr. Sheng Bai Zhang (National Renewable Energy Laboratory/NREL, Colorado, EUA). Data: 06.05.2002.

Prof. Dr. Su-Huai Wei (National Renewable Energy Laboratory/NREL, Colorado, EUA). Período: de 02 a 16.04.2002

Prof. Dr. Tara Prasad Das (Department of Physics, State University of New York , Albany, USA). Data: 03.09.2002.

Prof. Dr. Tomé Mauro Schmidt (Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG). Visitas curtas.

Prof. Dr. Willian Ricardo Rocha (Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, MG). Visitas curtas.

Pessoal Administrativo:

Marisa Fernandes da Silva

Sandra Regina Rodrigues Ribeiro (a partir de outubro de 2002)

Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas (LESBT)

a) Grupo de Baixas Temperaturas

Docentes:

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

Pós-Doutorandos:

José Antonio Huamani Coaquira (FAPESP)
Luciana Kazumi Hanamoto (FAPESP)
Ramon Valls Martin (FAFAPES)
Xavier Gratens (FAPESP)

Doutorandos:

John Carlos M. Uchoa (CNPq)
Luciana Kazumi Hanamoto (CAPES)
Ricardo Faveron de Oliveira (CAPES)

Mestrandos:

Rafael Alejandro Cajacuri Merino (sem bolsa)
Sergio Turano de Souza (CNPQ)

Iniciação Científica:

Marcelo Scolaro Morlotti (CNPq/PIBIC)

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:

Prof. Dr. Giorgio Frossati (Universidade Leiden, Holanda). Período: de 12.04 a 26.04.2002.

Prof. Dr. Yaacov Shapira (Tufts University, EUA). Período: de 1º a 15.04.2002.

Mirek Owzarkowski (Empresa Cryogenics, Londres, Inglaterra). Período de 02 a 07.07.2002.

Thomas Holubar (Empresa Cryogenics, Londres, Inglaterra). Período: de 18.03 a 08.04.2002.

Thomas Holubar (Empresa Cryogenics, Londres, Inglaterra). Período: de 02 a 17.07.2002.

b) Grupo de Transição de Fase e Supercondutividade

Docentes:

Armando Paduan Filho
Carlos Castilla Becerra
Carlos Henrique Westphal
Renato de Figueiredo Jardim

Pós-Doutorando:

Fábio Coral Fonseca (FAPESP)

Doutorandos:

Alessandro de Souza Carneiro (FAPESP)
José Antônio Souza (FAPESP)
Márcia Tsuyama Escote (FAPESP)
Zulmara Virgínia de Carvalho (CNPq)
Vinicius Meza (FAPESP)

Mestrando:

José Antônio Souza (FAPESP)

Iniciação Científica:

Solange de Andrade (FAPESP)

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:

Prof. Dr. Fernando Palacio (Universidade de Zaragoza, Zaragoza, Espanha). Período: de 19.01 a 02.02.2002.

Prof. Dr. Milton Torikachvili (San Diego, State University, San Diego CA, USA). Período: de 20.07 a 20.08.2001.

Pessoal Técnico:

Carlos Alberto Barioni
Eronides Alves de Almeida
Fábio Henrique Grossi
Flavio do Carmo Fontenelle
José Alexandre dos Santos
José Teodosio da Silva
Olimpio Ribeiro da Fonseca Neto
Rui Fernandes de Oliveira
Vagner Braghin
Walter Soares de Lima

Pessoal Administrativo:

Cecília Aparecida Cavalheiro Maia

Laboratório de Materiais Magnéticos (LMM)

Docentes:

Antônio Domingues dos Santos
Carmen Silvia de Moya Partiti

Gerardo Fabián Goya
Frank Patrick Missell
Hercílio Rodolfo Rechenberg
Valquíria Villas Boas Gomes Missell

Pós-Doutoranda:

Thelma de Souza Berquó (FAPESP)

Doutorandos:

Alessandro Martins (FAPESP)
Angela Dayana Barra Barrera (FAPESP)
Denis Rezende de Jesus (CNPq)
Jeroen Schoenmaker (FAPESP)
Rafael Alejandro Cajacuri Merino (FAPESP)
Regina K. Murakami (FAPESP)
Shintaro Jonen (FAPESP)

Iniciação Científica:

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

Colaboradores Permanentes:

Prof. Dr. Antônio Carlos Seabra (Laboratório de Sistemas Integráveis da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo).

Prof. Dr. Yves Souche (Centre National de Recherche Scientifique - CNRS, Grenoble, França).

Dra. Rosely A.L. Imbernon (Universidade de Moji das Cruzes - UMC, Moji das Cruzes, SP).

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:

Prof. Dr. Luiz Carlos Sampaio Lima (Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF, Rio de Janeiro, RJ). Período: de 19.08 a 19.09.2002.

Pessoal Técnico:

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

Pessoal Administrativo:

Iran Mamedes de Amorim

Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS-MBE)

Docentes:

Euzei Conceição Fernandes da Silva

Guennadii Michailovich Gusev
José Roberto Leite
Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Pós-Doutorandos:

Julio Antônio Nieri de Toledo Soares (FAPESP)
Lara Kühl Teles (FAPESP)
Nilo Mauricio Sotomayor Choque (FAPESP)
Sara Cristina Pinto Rodrigues (FAPESP)
Sandro Martini (FAPESP)
Virgílio de Carvalho dos Anjos (FAPESP)

Doutorandos:

Adriano Manoel dos Santos
Angela Maria Ortiz de Zevallos Marquez
Cássio Sanguini Sérgio
Celso de Araújo Duarte
David Gregório Pacheco Salazar
Luis Eugenio Ramos
Marcelo Jacob da Silva
Marcelo Marques
Odille Cue Noriega
Tomas Erikson Lamas

Mestrandos:

Ivan Ramos Pagnossin
Joelson Cott Garcia
Sérgio Takimoto Mauricio

Iniciação Científica:

Jefferson Gomes da Silva (CNPq/PIBIC)
Renato de Carvalho (CNPq/PIBIC)
Tiago Ezequiel Corrêa (CNPq/PIBIC)

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:

Prof. Dr. Américo Sheitiro Tabata (UNESP de Bauru, Departamento de Física, Bauru, SP). Visitas curtas.

Prof. Dr. Detlef Schikora (Universidade de Paderborn, Paderborn, Alemanha). Período: de 02 a 14.12.2002.

Prof. Dr. Donat As (Universidade de Paderborn, Departamento de Física, Paderborn, Alemanha). Período: de 17.08 a 04.09.2002.

Prof. Dr. Edilson Sérgio Silveira (Universidade Federal do Paraná, Departamento de Física, Curitiba, PR). Período: de 16 a 19.01.2002.

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

Prof. Dr. Fernando Cerdeira (Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP). Períodos: (a) 02.04.2002, (b) de 13 a 14.08.2002, (c)

20.08.2002, (d) 27.08.2002, (e) 03.09.2002, (f) 17.09.2002, (g) de 30 a 31.10.2002, (h) de 21 a 22.11.2002, (i) de 04 a 05.12.2002.

Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi (Universidade de São Paulo, Instituto de Física de São Carlos, São Carlos, SP). Dias: (a) 07.02.2002; (b); 13.03.2002 (c); 15.05.2002, (d) 26.09.2002.

Prof. Dr. Ivan Costa da Cunha Lima (Universidade Estadual do Rio de Janeiro - UERJ, Instituto de Física, Rio de Janeiro, RJ). Períodos: (a) 13.03.2002, (b) de 15 a 16.05.2002, (c) de 25 a 26.11.2002, (d) de 28.11 a 06.12.2002.

Prof. Dr. Jaime A. Freitas Jr. (ESTD - Electronic Materials Branch, Naval Research Laboratory, em Washington D.C., EUA). Período: de 24 a 31.05.2002.

Prof. Dr. Jean Claude Portal (Centre National de Recherche Scientifique - CNRS-LCMI, França). Período: de 05 a 15.04.2002.

Prof. Dr. José Luiz Aarestrup Alves (Fundação de Ensino Superior de São João Del Rei, Departamento de Ciências Naturais, São João Del Rei, MG). Período: de 24 a 28.02.2002.

Prof. Dr. Joseph Greene (University of Illinois, Urbana, IL, EUA). Período: de 08 a 09.05.2002.

Prof. Dr. Klaus Lischka (Universidade Paderborn, Departamento de Física, Paderborn, Alemanha). Período: de 04 a 16.12.2002.

Prof. Dr. Luiz Guimarães Ferreira (Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP). Períodos: (a) 27.02.2002, (b) 08.03.2002, (c) 05.04.2002, (d) 03.05.2002, (e) de 24 a 25.10.2002.

Prof. Dr. Marco Aurélio Boselli (Universidade Estadual do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ). Data: 13.03.2002.

Prof. Dr. Mauro Roberto Sardela Jr. (Center of Microanalysis of Materials, Frederick Seitz Materials Research Laboratory, University of Illinois, Urbana, IL, EUA) Data: 17.10.2002.

Prof. Dr. Oleg Balev (Universidade Federal de São Carlos, Instituto de Física, São Carlos, SP). Data: 28.11.2002.

Prof. Dr. Peter Hess (Universität Heidelberg, Heidelberg, Alemanha) Período: de 21 a 23.02.2002.

Prof. Dr. Valder Nogueira Freire (Universidade Federal do Ceará - UFC, Departamento de Física, Fortaleza, CE). Período: de 16.08 a 15.09.2002.

Pessoal Técnico:

Márcia Ribeiro

José Geraldo Chagas

Pessoal Administrativo:

Mônica Jimenez Clauzet (a partir de 22 de fevereiro de 2002)

4b - Trabalhos em Andamento ou Concluídos em 2001:

Grupo Teórico de Materiais

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

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

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

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

“Propriedades Eletrônicas e Estruturais Relacionadas a Superfícies, Interfaces e Impurezas Simples e Complexas em Semicondutores”

Ferraz, A.C.

As superfícies e interfaces semicondutoras reconstróem-se diferentemente sob várias condições, tais como o crescimento epitaxial, temperatura, devido a deposição de camadas de passivadores ou surfactantes, ou ainda induzidas por defeitos de formação. O mecanismo principal é regido pelas ligações atômicas, entretanto, devido ao alto grau de complexidade dos processos e sistemas, tem-se a necessidade de um estudo rigoroso por meio de cálculos de primeiros princípios, a fim de se esclarecer tais mecanismos de formação atômica ou molecular. Desta forma, estudamos teoricamente, por meio da teoria do funcional da densidade e do método de dinâmica molecular quântica, as bases energéticas e físico-químicas relacionadas a adsorções atômicas e moleculares em superfícies e interfaces semicondutoras. No desenvolvimento destes projetos estiveram envolvidos o Prof. Ronei Miotto da Universidade de Brasília, os professores Roberto Hiroki Miwa e Eduardo Kojy

Takahashi da Universidade Federal de Uberlândia, o Prof. G.P. Srivastava da Universidade de Exeter, Inglaterra, o pós-doutorando Fernando de León-Pérez de Cuba, e os estudantes de pós-graduação Ferenc Diniz Kiss e Sandro Inácio de Souza.

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

Canuto, S.

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

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

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

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

“Propriedades Magnéticas e Hiperfinas de Sistemas Metálicos Complexos”

Frota-Pessôa, S.

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

Mantemos contato com vários grupos no Brasil e no exterior. Em 1998, mantivemos colaborações bastante produtivas com o grupo experimental do Hahn Meitner Institut, Berlim (Alemanha), liderado pelo Prof. Dietmar Riegel e com o Dr. Roberto

Bechara Muniz da Universidade Federal Fluminense, Niterói (Brasil). Temos cooperado também com a Dra. Helena Maria Petrilli do IFUSP.

- i) Motivados por resultados experimentais interessantes obtidos pelo grupo do Prof. Dietmar Riegel (Hahn Meitner Institut, Berlim, Alemanha) temos utilizado o método RS-LMTO-ASA de primeiros princípios para investigar o comportamento magnético e hiperfino de impurezas substitucionais e intersticiais de elementos de transição, em hospedeiros metálicos, utilizando a Tabela Periódica. Hospedeiros de metal simples e de metal de transição estão sendo considerados. O objetivo principal é aclarar os mecanismos de formação de momento local no sítio da impureza nesses materiais.
- ii) Ainda em colaboração com o grupo de Berlim, temos investigado o comportamento de pares de impurezas de transição em Cu, Ag e Au. Em particular, o par Fe-Cr em Au foi medido, apresentando resultados de campo hiperfino no Fe inesperados e interessantes, que procuramos explicar utilizando cálculos de estrutura eletrônica. O acoplamento magnético de troca J entre as impurezas do par tem um papel importante e também está sendo investigado.
- iii) Por meio de cálculos de estrutura eletrônica, investigamos o comportamento magnético e hiperfino na região de impurezas de Sc, V, Cr, Mn, Co, Ni e Cu em SrFe₂, um composto que forma em fases de Laves. O Mn, Co, Ni e Cu foram introduzidos no sítio do Fe no sítio do Zr. Notamos que tratar impurezas isoladas em hospedeiros complexos, não é a primeira vez que um estudo de primeiros princípios envolvendo não só a impureza, mas a perturbação por ela introduzida nas várias camadas vizinhas é feito para sistemas metálicos complexos, isto é, binários com vários átomos por cela. Os resultados são comparados com dados experimentais da literatura.
- iv) É sabido que uma impureza de Fe em Pd polariza os sítios vizinhos dando origem ao conhecido “*momento gigante*”. Neste projeto investigamos impurezas e “*adatoms*” de Fe em superfície de Pd para verificar se ocorre fenômeno semelhante. Cálculos indicam que átomos de Fe colocados na superfície Pd(001) polarizam consideravelmente os vizinhos de Pd e dão origem a um momento bastante significativo. Impurezas e “*adatoms*” de Fe em superfícies de Pd(110) e Pd(111) também estão sendo investigados. Os resultados serão contrastados com os obtidos para monocamadas de Fe em superfícies de Pd. Camadas contrastados com os obtidos para monocamadas de Fe em superfícies de Pd. Camadas aleatórias de Fe_xPd_{1-x} em superfícies de Pd serão também estudadas utilizando códigos TB-LMTO-CPA. O projeto tem a participação de Ângela B. Klautau que elaborou uma tese de doutorado sobre o tema.
- v) O Cr normalmente se ordena em um arranjo complexo, aproximadamente antiferromagnético com momento local da ordem de 0,6 mB. Foi observado

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

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

“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. 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.
- b) Cálculos de estrutura eletrônica de defeitos relacionados com metais de transição e terras raras em Si, Ge, GaAs e SiC têm sido efetuados utilizando-se um modelo de super-célula (*large unit cell*). Iniciamos o estudo da estrutura eletrônica de impurezas substitucionais e intersticiais relacionados com metais de transição e terras raras em Si e SiC, trabalhando com super-células e dentro do formalismo FLAPW (full-potential linear augmented-plane wave). Este esquema permite também o estudo de relaxações e distorções do sistema com o que se obtém várias quantidades relevantes na caracterização dos centros, tais como parâmetros hiperfinos, desdobramentos devido ao acoplamento spin-órbita, etc.
- c) Este projeto tem a participação do Prof. Dr. João Francisco Justo Filho do Departamento de Sistemas Eletrônicos da Escola Politécnica da USP.

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

Petrilli, H. M.

Temos nos dedicado tradicionalmente ao estudo de propriedades locais em materiais metálicos, 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 magnetorresistência gigante tais como grãos de Co em Ag ou Cu. Este último projeto é desenvolvido em colaboração com a Dra. Renata N. Nogueira (FAPESP), no momento no Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da Escola Politécnica da USP.
- 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 UFS. 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. Schoen 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 nanotecnologias 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 S. Galvão (UNICAMP), Rosa Di Felice (Universidade de Modena, Itália) e 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 “Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos”, no âmbito do programa "Institutos do Milênio" - PADCT III". Estes projetos são realizados em colaboração com a Profa. Marília Junqueira Caldas (IFUSP), 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 $I \times V$ mostram que é possível identificar os mecanismos de tunelamento que contribuem para a estrutura fina presentes na curva característica.

Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas (LESBT)

a) Grupo de Baixas Temperaturas

Coordenador: Nei Fernandes de Oliveira Jr.

“Interações de Troca em Semicondutores Magnéticos Diluídos”

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

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

“Ultra-Baixas Temperaturas em Altíssimos Campos Magnéticos”

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

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

“Estruturas Epitaxiais Semicondutoras”

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

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

simulações de Monte Carlo para investigar os fenômenos de transporte elétrico, cálculo teórico dos espectros ópticos.

b) Grupo de Transição de Fase e Supercondutividade

Coordenador: Carlos Castilla Becerra

“Determinação de Corrente Crítica em Sistemas Supercondutores Granulares”

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

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

“Produção e Caracterização de Óxidos em Sistemas Supercondutores Granulares”

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

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

“Produção de Amostras Mono e Policristalinas de Óxidos Supercondutores”

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

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

“Magnetismo em Sistemas Diluídos”

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

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

“Magnetismo em Sistemas Moleculares”

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

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

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

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

O Laboratório de Supercondutividade está apto para caracterizar materiais de uma maneira geral por meio de diversas técnicas, i.g. resistividade elétrica, magnetorresistividade, susceptibilidade magnética ac e dc, número de Hall, curvas características $V \times I$, etc. Essas caracterizações podem, em geral, ser feitas em largas faixas de temperaturas e campos magnéticos. Em particular, o Grupo de Supercondutividade tem utilizado estas técnicas para obter informações sobre diversos tópicos de interesse em supercondutividade:

a) Propriedades Gerais de Redes Desordenadas de Junções Josephson

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

b) Propriedades Gerais do Estado Misto de Supercondutores do Tipo II

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

Laboratório de Materiais Magnéticos

Coordenador: Hercílio Rodolfo Rechenberg

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

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

As propriedades magnéticas de partículas com dimensões nanométricas podem diferir sensivelmente das do mesmo material em escala macroscópica, em virtude da fração relativamente grande de átomos próximos à superfície. Daí resultam efeitos

como uma forte contribuição superficial à anisotropia magnética e (especialmente em materiais ferrimagnéticos) a ocorrência de spins desalinhados (*spin canting*) e/ou de uma estrutura tipo vidro de spins na camada exterior da partícula. Visando a um estudo detalhado desses efeitos, estamos investigando sistemas de nanopartículas de NiFe_2O_4 e CuFe_2O_4 sintetizadas quimicamente, com diâmetros de 4 a 10 nm, por meio de técnicas magnetométricas e espectroscopia Mössbauer em campos aplicados de até 12 T.

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

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

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

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

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

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

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

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

Amostras de $\text{R}_6\text{Fe}_{10}\text{Al}_4$ (R = La ou Nd) foram anteriormente estudadas por magnetometria de amostra vibrante, SQUID e espectrometria Mössbauer (tese de S. Jonen). Esses materiais apresentam um ordenamento antiferromagnético constituído de camadas ferromagnéticas com spins alternadamente “up” e “down”, e exibem uma transição metamagnética ou “spin-flop” em campos da ordem de 2 T. Nos compostos com R = Nd são observados efeitos adicionais de irreversibilidade,

transições múltiplas, etc. que são atribuídas a um ordenamento não-colinear dos momentos da terra rara. Para elucidar estes efeitos estamos realizando medidas de difração de nêutrons na faixa de temperaturas 2-300 K, utilizando as facilidades do Instituto Laue-Langevin de Grenoble.

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

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

Sistemas intermetálicos que absorvem hidrogênio apresentam alterações em suas propriedades magnéticas, atribuídas à expansão da rede cristalina e/ou a mudanças na estrutura eletrônica. Os compostos $R_6Fe_{13-x}M_{1+x}$ absorvem com facilidade até 15 átomos de H por fórmula unitária, resultando uma expansão volumétrica de ~20% e a mudança de antiferromagnetismo para ferromagnetismo. Tomando como base o composto $La_6Fe_{10}Al_4$, estamos estudando as propriedades do hidreto correspondente e, em particular, as transformações resultantes da retirada gradual e controlada do hidrogênio incorporado.

“Mecanosíntese e Caracterização de Ferritas Nanoestruturadas”

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

Esta linha de pesquisa se destina à obtenção de compostos cerâmicos nanoestruturados do tipo dos óxidos e calcogenetos $II-III_2-X_4$, com II e III metais de transição e $X = O, S, Se$ 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 SiO_2 , óxidos AB_2O_4 , com estrutura de espinélio e ortoferritas YFeO_3 . Procura-se determinar quais características fundamentais da transição superparamagnética e do estado ordenado são universais, no sentido de serem independentes do material escolhido.

“Estudo Estrutural e Magnético de Filmes Finos de Fe-Pt e Co-Pt”

Martins, A. e Santos, A.D.

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

Estudamos anteriormente, filmes finos de $\text{Fe}_x\text{Pt}_{1-x}$, com $x = 0,15 \sim 0,75$. Os filmes foram elaborados através da técnica de “magnetron sputtering”, a partir de alvos dos elementos puros. Como substratos usou-se silício (100), silício (111), SiO_2 e SiO_2 com um *buffer* de cerca de 500 Å de Pt, aquecidos a temperaturas de 200 e 300°C. Estes filmes foram caracterizados magneticamente através do magnetômetro de amostra vibrante (VSM) e estruturalmente por difração de Raios X. Observamos que existe uma tendência geral de crescimento dos filmes na direção [111]. Por outro lado, os filmes crescidos sobre o *buffer* de Pt apresentaram maior tamanho de grão. Em relação aos filmes binários de Fe-Pt, estamos expandindo estes estudos. Podemos obter melhores resultados em relação à anisotropia e coercividade se conseguirmos produzir amostras ordenadas. Trabalhamos com a estequiometria FePt, com vistas a obter uma estrutura cristalina tetragonal e usamos substratos que possam induzir uma epitaxia conveniente para o ordenamento da estrutura do filme. Este substrato é o de MgO. Desenvolvemos estudos visando a otimização deste ordenamento, em função da espessura do filme de FePt e de um eventual “buffer” de Pt. Estudamos também o efeito da temperatura de deposição e de pós-tratamento térmico sobre o ordenamento cristalino e a anisotropia magnética. Para a análise deste ordenamento estrutural utilizamos as técnicas tradicionais de difração de Raios X, que serão complementadas por medidas de EXAFS a serem realizadas no Laboratório Nacional de Luz Sincrotron (LNLS).

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

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

Temos estudado os efeitos magnetoópticos nas ordens de difração luminosa em redes bidimensionais de partículas magnéticas. A partir dos dados das ordens de difração pudemos estabelecer a estrutura média de domínios em partículas de dimensões micrométricas.

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

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

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

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

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

Em particular, o estudo de exchange bias em filmes finos de bicamadas FM/AFM teve maior interesse por fazerem parte de um dispositivo conhecido como “spin valve”. Este dispositivo têm importantes aplicações tecnológicas como sensores de campos magnéticos, uma vez que a magnetorresistência do “spin valve” é uma função sensível da orientação das suas camadas ferromagnéticas. O progresso enorme na última década em aumentar a densidade de informações em discos rígidos resultou principalmente do desenvolvimento de cabeças de gravação empregando “spin valves”.

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

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

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

Desenvolvemos um microscópio óptico de varredura em campo próximo (SNOM), para ser operado no modo magnetoóptico (SNOM-MO). O SNOM é basicamente um Microscópio de Força Atômica (AFM), onde a ponta foi substituída por uma fibra óptica. Assim podemos iluminar a amostra através da abertura da fibra, que se encontra a uma distância nanoscópica da amostra. A luz refletida é enviada a uma fotomultiplicadora e analisada para a construção ponto-a-ponto da imagem. Para distâncias fibra/amostra desta ordem de grandeza, a interação da luz com a amostra se dá por meio de ondas evanescentes (não propagativas). Portanto, a resolução da imagem construída, não tem sua resolução limitada a $\lambda/2$, como é característico das ondas luminosas propagativas. Ficando portanto, a resolução da imagem, definida pela abertura luminosa da fibra óptica e pelo método de varredura da amostra. Como o objetivo deste projeto é o de estudar materiais magnéticos, foi previsto a inserção de dispositivos de análise de polarização da luz refletida, em termos do efeito Kerr magnetoóptico transversal. Neste modo, pode-se obter informações sobre a estrutura de domínios de materiais que apresentem eixo de fácil magnetização no plano da amostra.

Este microscópio foi inteiramente construído no LLN, o que lhe dá flexibilidade para o desenvolvimento de novas configurações. Ele utiliza um diodo laser vermelho ($\lambda=635$ nm), fibras óticas monomodo, células foto-multiplicadoras e polarizadores à película. Para a obtenção de uma pequena abertura na fibra ótica, ela é estirada em uma estiradora de micropipetas. Assim obtemos um afinamento regular da ponta da fibra. Posteriormente é depositada obliquamente sobre a ponta da fibra, uma camada de Al, de tal maneira que reste uma pequena abertura na extremidade desta. Perfis de difração da luz na ponta da fibra nos indicam aberturas tipicamente da ordem de centenas de nm. O modo AFM é obtido vibrando-se a fibra por meio de uma bilâmina 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 ótico estão funcionando corretamente, porém como o sinal magnetoóptico é da ordem de 0,1 a 1% do sinal ótico, a eletrônica de controle da varredura e altitude não está apresentando a *performance* necessária. Por outro lado, testes estáticos no modo magnetoóptico nos permitiram extrair ciclos de histerese locais na amostra, e imagens de susceptibilidade magnética. O que demonstra a

possibilidade de sensoriar magneticamente a amostra, através do efeito Kerr transversal, mesmo com ondas evanescentes.

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

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

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

“Incorporação de Metais de Transição em Goethita”

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

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

“Espectros Mössbauer de Sedimentos de Represas: Aplicação ao Estudo Geoquímico do Meio Ambiente”

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

A difração de Raios X e a Espectroscopia Mössbauer foram utilizadas para estudar amostras de sedimentos das Represas Billings e Guarapiranga, São Paulo. Foram medidas amostras coletadas em pontos diferentes das represas. Os difratogramas de Raios X mostraram diferenças de cristalinidade entre as amostras, presença de goethita em todas e apenas uma amostra apresenta os picos da hematita. Os espectros Mössbauer de todas as amostras apresentaram um dubleto que pode ser associado à ferrihidrita e um sexteto com valor de campo hiperfino associado à goethita. Algumas amostras apresentaram um sexteto associado à presença de hematita e as outras um sexteto com campo hiperfino mais baixo, provavelmente associado à

goethita com impureza substitucional, pois as análises químicas mostraram que a amostra com maior porcentagem de metais pesados presentes apresenta campo hiperfino menor. É possível também observar que a amostra com maior presença de fósforo apresenta a maior proporção relativa de ferrihidrita em acordo com um trabalho publicado recentemente. Atualmente estamos estudando sedimentos de Taiaçupeba.

“Caracterização das Propriedades Magnéticas das Turfas do Médio Vale do Rio Paraíba do Sul, Estado de São Paulo: Uma Contribuição da Espectroscopia Mössbauer ao Magnetismo Ambiental”

Berquó, T.S. e Partiti, C.S.M.

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

“Propriedades Magnéticas e Estruturais de Materiais Magnéticos Nanocristalinos à Base de PrFeB com Adição de Cr”

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

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

Fitas amorfas obtidas a partir de ligas com composições $\text{Pr}_5\text{Fe}_{77-x}\text{Cr}_x\text{B}_{18}$ ($x=0, 1, 2, 2,5, 3, 4$ e 5) foram obtidas via solidificação rápida e posteriormente cristalizadas por meio de um tratamento térmico convencional e por meio de um tratamento no qual passam-se altas correntes pelas fitas (“flash annealing”), resultando em materiais nanocristalinos. A caracterização magnética (medidas de magnetização em função do campo aplicado e em função da temperatura) e estrutural (via difração de Raios X) desses materiais foi realizada. A composição que apresentou as melhores propriedades magnéticas foi $x=3$ e será estudada em detalhes do ponto de vista magnético (medidas de campo coercivo em função da temperatura, medidas de espectroscopia Mössbauer) e do ponto de vista estrutural (medidas de microscopia eletrônica de transmissão e de varredura, e microscopia de força). O campo coercivo da composição com $x=3$ é 50% maior do que o campo coercivo da composição análoga com Nd e 40% maior do que a composição com Pr e sem Cr. Um estudo da

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

Laboratório de Novos Materiais e Semicondutores

(LNMS-MBE)

Coordenador: José Roberto Leite

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

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

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

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

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

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

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

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

Furthmüller, J. (Univ. de Jena, Alemanha); Alves, J.L.A. (FUNREI) e Alves, H.W.L. (FUNREI).

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

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

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

Este projeto de pesquisa envolve o estudo das propriedades elétricas e eletrônicas de hetero-estruturas semicondutoras contendo pontos quânticos (QDs, quantum dots), crescidas pela técnica de epitaxia por feixe molecular (MBE), utilizando medidas elétrica e de fotoluminescência. Pretendemos analisar estruturas com arquiteturas que servem de base para a fabricação de fotodetectores operando na faixa de décimos de micrometros. Em geral, estas estruturas têm um gás bidimensional de elétrons nas imediações dos QDs; e nossa intenção é determinar as características dos portadores deste gás (ocupações das sub-bandas e suas respectivas mobilidades) com o intuito de otimizar o desempenho destes dispositivos. A primeira demonstração que os QDs são eficientes detectores de radiação infravermelha foi reportada em novembro de 1998 por S.J. Xu e colaboradores[1]. A partir desta data, estruturas com diferentes arquiteturas têm sido propostas para a confecção destes fotodetectores e suas potencialidades estão sendo testadas. Este também é o nosso intuito.

A função de um fotodetector é converter o resultado de excitação óptica em sinal elétrico. Basicamente, uma estrutura típica de um fotocondutor lateral[2] de QDs consiste de uma estrutura de poço quântico com dopagem modulada na barreira contendo no interior do poço uma camada de pontos quânticos. Os elétrons oriundos dos dopantes na barreira são transferidos para o interior do poço quântico e capturados pelos QDs. Em uma situação ideal, devemos ter apenas elétrons confinados nos QDs e não no poço quântico. A presença de um gás bidimensional de elétrons dá origem a uma corrente de escuro, indesejável para o bom desempenho do fotodetector. Com a incidência da radiação infravermelha, os elétrons são excitados dos QDs para os estados acessíveis do poço quântico, gerando corrente elétrica. Para ter um bom desempenho, os fotodetectores devem ter alta sensibilidade, alta velocidade de resposta e ruído mínimo. Além disso, devem ser compactos, devem utilizar baixas voltagens e correntes e serem confiáveis sob as condições de operação. O ganho fotocondutivo de um fotodetector pode ser expresso como $G_{ph} \propto \mu \tau$ onde μ e τ são a mobilidade e o tempo de vida dos portadores fotoexcitados, respectivamente. Esta equação indica-nos que para melhorar o desempenho de um fotocondutor devemos ter portadores com alta mobilidade e longo tempo de vida no canal condutor. Em particular, o bom desempenho de fotodetectores de QDs depende

das seguintes características: 1) O tamanho dos QDs deve ser tal que eles tenham apenas um estado ligado. Desta forma, os QDs tornam-se neutros depois de serem excitados pela radiação infravermelha e não mais atuam como centros de espalhamento Coulombiano para o transporte eletrônico lateral. 2) O(s) canal(is) condutores devem proporcionar altas mobilidades aos portadores fotoexcitados. 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 fotoexcitados nestas estruturas. Pretendemos, portanto, investigar com medidas elétricas as características dos portadores fotoexcitados. Analisaremos arquiteturas com diferentes dimensões para o canal condutor, para as camadas de espaçamento entre os dopantes e os elétrons, e para diferentes concentrações dos QDs. A influência do número de períodos nas estruturas também será investigada.

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

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

Scolfaro, L.M.R.; Marques, M.; Teles, L.K.; Leite, J.R.; Bechstedt, F. (Univ. de Jena, Alemanha); Furthmüller, J. (Univ. de Jena, Alemanha) e Ferreira, L.G. (UNICAMP).

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

simulações teóricas da liga. São investigados os efeitos de separação de fase e de ordenamento nas ligas.

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

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

Nós estudamos o comportamento dos picos de comensurabilidade em sistemas de antipontos 2D na presença de campos magnéticos com componentes paralelos à superfície das amostras. Para isto, foram fabricadas quatro amostras com períodos de antipontos de 0.5, 1.0, 1.5, e 2.0 μm . Observamos dois picos de comensurabilidade para cada uma das medidas, a amplitude deles é maior para a amostra com período de 0.5 μm , e eles tendem a diminuir com o aumento de d , o mesmo acontecendo com largura dos picos. Observamos também o deslocamento do pico de campo baixo para campos mais altos de acordo com o aumento do período da rede. A partir da análise dos resultados das medidas experimentais podem se inferir três fatos importantes: o primeiro é o deslocamento dos picos de comensurabilidade para regiões de campos mais altos, com o aumento do valor da componente paralela do campo magnético. O segundo fato observado nas medidas das quatro amostras é o alargamento dos picos de comensurabilidade também com o aumento da componente paralela e o terceiro fato de interesse observado é o aparecimento de novos picos de comensurabilidade na presença de campos magnéticos paralelos muito intensos. Isso pode ser observado nitidamente no caso da amostra com $d = 0.5 \mu\text{m}$. Também nesta amostra foi observada a diminuição da amplitude do pico de ressonância com o aumento da componente paralela do campo magnético. A aproximação empregada baseia-se na mudança anisotrópica da massa efetiva eletrônica na direção x para simular o efeito da distorção do contorno de Fermi. Desta forma, as trajetórias eletrônicas terão uma forma elíptica próxima das trajetórias reais que têm a forma de um “*oval de Cassini*”. Esta aproximação permitiu a realização de cálculos de magnetorresistência em campos inclinados, permitindo observar de forma aproximada os mesmos efeitos observados nas medidas experimentais. Nós investigamos também as oscilações anômalas da magnetorresistência em campo baixo dos poços quânticos parabólicos largos. Nós atribuímos essas oscilações a efeitos de tamanho devido à comensurabilidade entre o raio do ciclotron e a largura do poço.

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

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

O objetivo deste trabalho é o estudo experimental do transporte eletrônico no gás quase-tridimensional (poços quânticos parabólicos) em campos magnéticos intensos (limite quântico). Nos temos medido a magnetorresistência de poços quânticos parabólicos de AlGaAs com diferentes larguras ($W=1000 - 4000 \text{ \AA}$) na presença de

campo magnético inclinado. Nos 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. Nos sugerimos a formação de novos estados correlacionados do gás de elétrons tridimensional a valores do fator de preenchimento de Landau de $1/3$, em analogia com o efeito Hall quântico fracionário bidimensional.

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

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

O efeito Hall quântico integral (QHE) pode ser explicado no contexto de elétrons não interagentes. A incorporação da interação elétron-elétron conduz a uma variedade de fases eletrônicas incomuns. Recentemente, variedades de fases correlacionadas do QHE foram previstas, quando graus de liberdade adicionais, associados com números de camadas 2D e sub-bandas foram introduzidos. O poço parabólico permite a formação de uma camada grossa e diluída ($1000-5000 \text{ \AA}$) de portadores de carga com alta mobilidade com densidade uniforme (ao longo de direção de crescimento). Num PQW largo com várias sub-bandas ocupadas, o gap de energia em campo magnético intenso é determinado pelo espaçamento de níveis de energia em campo zero ΔE_{ij} , o qual é muito menor que a energia do ciclotron, 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 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ de tipo n e p com diferentes larguras. Nos achamos que em campo magnético perpendicular o platô de Hall e o mínimo na resistência diagonal correspondente ao fator de preenchimento $\nu=1$ estão ausentes em amostras com $W_c=1000 \text{ \AA}$. Esta observação está em acordo com o proposto na instabilidade da CDW, porém em valores mais altos de r_s que aqueles propostos no modelo teórico. Nos também encontramos que em campo magnético inclinado o efeito Hall quântico é recuperado o qual confirma o caráter cooperativo do efeito observado.

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

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

Recentemente, uma ampla classe de fenômenos associados com cruzamento de níveis de Landau com orientações de spin opostas tem recebido muita atenção. O interesse tem sido motivado pela estreita analogia entre estados bidimensionais (2D) no regime quântico de Hall e de ferromagnetos eletrônicos convencionais. A inclusão da interação de troca poderia conduzir a uma transição ferromagnética não

polarizada de primeira ordem, quando a energia de troca torna-se maior que a separação entre sub-bandas. Estas transições de fase pertencem a uma classe de fenômenos conhecidos como ferromagnetismo quântico de Hall (QHF). Nos estudamos QHF em poços parabólicos de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ de tipo n e p com diferentes larguras. Nos observamos um pico na magnetorresistência transversal devido a transição paramagnético ferromagnético da primeira ordem ocorre em campo magnético inclinado, quando energia do nível de Landau de spin para cima coincide com nível de Landau de spin para baixo.

4c - Projetos de Pesquisa com Financiamento Externo:

Adalberto Fazzio

Título: Projeto: “Simulação Computacional de Materiais Nanoestruturados”.

Fonte: TEMÁTICO FAPESP

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

Período de Vigência: de 01.05.2002 a 30.04.2006.

André Bohomoletz Henriques

Título: “Apoio à Pesquisa em Materiais Semicondutores”.

Fonte: PRÓ-REITORIA DE PESQUISA-USP

Montante: R\$ 3.500,00

Período de Vigência: 2002.

Antônio Domingues dos Santos

Título: Auxílio à Pesquisa: “Estudo Magnetoóptico de redes de partículas magnéticas microscópicas”.

Fonte: - FAPESP 99/06503-8

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

Período de vigência: de julho de 1999 a janeiro de 2002.

Armando Corbani Ferraz

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

Fonte: CAPES/PROCAD

Montante: R\$ 111.000,00

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

Carlos Castilla Becerra

Título: “Magnetismo em Antiferromagnets Diluídos”.

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

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

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

Gerardo Fabián Goya

Título: “Mecanosíntese e Caracterização de Materiais Magnéticos Nanoestruturados”.

Fonte: FAPESP 01/02598-3

Montante: R\$ 23.798,23 + US\$ 37,098.76

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

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

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

Montante: R\$ 70.000,00

Período de Vigência: de 2001 a 2005.

Guennadii Michailovich Gusev

Título: “Mesoscopic Vertical Transport in Superlattices and Multilayered Semiconductor Structures”.

Fonte: USP/COFECUB

Montante: R\$ 7.000,00

Período de Vigência: 2001.

Helena Maria Petrilli

Título: “IMMP - Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos”.

Fonte: PRÓ-REITORIA DE PESQUISA-USP

Montante: R\$ 3.500,00

Período de Vigência: 2002.

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 2003 (concedido em 1998).

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

Fonte: PROJETO TEMÁTICO FAPESP

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

Período da Vigência: de 1999 a 2003.

Lucy Vitória Credidio Assali

Título: Projeto de Apoio a Grupos de Pesquisa: “Métodos e Algoritmos de Escala-Múltipla para Materiais”.

Fonte: PRÓ-REITORIA DE PESQUISA-USP

Montante: R\$ 3.500,00

Período de Vigência: 2002.

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

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

Fonte: FAPESP

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

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

Projeto de Apoio à Pesquisa.

Fonte: PRÓ-REITORIA DE PESQUISA-USP

Montante: R\$ 3.500,00

Período de Vigência: 2002.

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

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

Fonte: TEMÁTICO FAPESP

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

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

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

Fonte: PRONEX

Montante: R\$ 400.000,00

Período de Vigência: Período de Vigência: de 1996 a 2001 e de 2001 a 2002

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.

Projeto de Apoio à Pesquisa.

Fonte: PRÓ-REITORIA DE PESQUISA-USP

Montante: R\$ 3.500,00

Período de Vigência: 2002.

Projeto de Apoio à Pesquisa.

Fonte: PRÓ-REITORIA DE PESQUISA-USP

Montante: R\$ 3.500,00

Período de Vigência: 2002.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

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

Fonte: FAPESP

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

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

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

Fonte: CAPES/DAAD/PROBRAL

Montante: R\$ 43.761,00

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

4d - Estágios e Visitas Científicas:

Adalberto Fazzio

Visita de colaboração científica.

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

Período: de 07 de fevereiro a 07 de março de 2002.

Visita de colaboração científica.

Grupo do Prof. Ronaldo Mota da Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, RS.

Período: de 22 de junho a 10 de julho de 2002.

Reunião da Rede Nacional de Pesquisa em Materiais Nanoestruturados, no Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS.

Período: de 14 a 17 de dezembro de 2002.

André Bohomoletz Henriques

Visita de colaboração científica.

Oxford University, Oxford, Inglaterra.

Período: de 15 de fevereiro a 08 de março de 2002.

Visita de colaboração científica.

Oxford University, Oxford, Inglaterra.

Período: de 03 a 10 de agosto de 2002.

Visita de colaboração científica.

Oxford University, Oxford, Inglaterra.

Período: de 09 de setembro a 09 de novembro de 2002.

Antônio Domingues dos Santos

Visita de colaboração científica.

Laboratoire Louis Néel - CNRS, Grenoble, França.

Período: de 26 de junho a 19 de julho de 2002.

Visita de colaboração científica.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF, Rio de Janeiro, RJ.

Período: de 09 a 18 de dezembro de 2002.

Antônio José Roque da Silva

Reunião no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, Campinas, SP.

Data: 26 de junho de março de 2002.

Visita de colaboração científica.

Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ.

Período: de 29 de setembro a 02 de outubro de 2002.

Reunião da Rede Nacional de Pesquisa em Materiais Nanoestruturados, no Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS.

Período: de 14 a 17 de dezembro de 2002.

Carmen Silvia de Moya Partiti

Visita de colaboração científica.

Escola Federal de Engenharia de Itajubá, Itajubá, MG.

Período: de 03 a 04 de outubro de 2002.

Gerardo Fabián Goya

Visita de colaboração científica.

Biophysics Laboratory Joliot-Curie, Paris, França.

Período: de 03 a 06 de maio de 2002.

Visita de colaboração científica.

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

Período: de 15 a 17 de agosto de 2002.

Visita de colaboração científica.

Institut für Neue Materialien, Universität des Saarlandes, Saarbruecken, Alemanha.

Período: de 13 de setembro a 08 de novembro de 2002.

Guennadii Michailovich Gusev

Visita de colaboração científica.

Projeto de Pesquisa USP/COFECUB.

High Magnetic Field Laboratory, Grenoble, França.

Período: de 30 de junho a 21 de julho de 2002.

Visita de colaboração científica.

Projeto de Pesquisa USP/COFECUB.

High Magnetic Field Laboratory, Grenoble, França.

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

Helena Maria Petrilli

Oficina de Trabalho (Projeto Temático da FAPESP).

Grupo Nanomol do Departamento de Física Aplicada, Instituto de Física Gleb Wataghin da UNICAMP, Campinas, SP.

Data: 17 de abril de 2002.

Visita de colaboração científica.

Grupo da Profa. Dra. Elisa Molinaria, Universidade de Modena, Modena, Itália.

Período: de 03 a 20 de outubro de 2002.

Visita de colaboração científica.

Grupo do Prof. Mario Rentería do Departamento de Física da Faculdade de Ciências Exatas da Universidade Nacional de La Plata, La Plata, Argentina.
Período: de 13 a 18 de dezembro de 2002.

Hercílio Rodolfo Rechenberg

Visita de colaboração científica.
Instituto de Química da Universidade de Brasília, Brasília, DF.
Período: de 24 a 28 de junho de 2002.

Visita de colaboração científica.
Instituto de Química da Universidade de Brasília, Brasília, DF.
Período: de 18 a 19 de julho de 2002.

Visita de colaboração científica.
Instituto Laue-Langevin, Grenoble, França
Período: de 07 a 08 de setembro de 2002.

Visita de colaboração científica.
Universidade de Zaragoza, Zaragoza, Espanha.
Período: de 09 a 10 de setembro de 2002.

José Roberto Leite

Visita de colaboração científica.
Laboratório de Optoeletrônica da Universidade de Paderborn, Paderborn, Alemanha.
Período: de 15 a 20 de julho de 2002.

Reunião sobre Nanociência e Tecnologia no CNPq, Brasília, DF.
Data: 29 de agosto de 2002.

Reunião do Conselho Latino Americano de Física - CLAF (participação como Presidente da Federação Latino Americana de Sociedades de Física (FELASOFI) e da Sociedade Brasileira de Física (SBF)), Bogotá, Colômbia.
Período: 10 a 16 de novembro. 2002.

Lucy Vitória Credidio Assali

Visita de colaboração científica.
Universidade de Aveiro, Aveiro, Portugal.
Período: de 10 a 27 de junho de 2002.

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Visita de colaboração científica.
Laboratório de Optoeletrônica da Universidade de Paderborn, Paderborn, Alemanha.
Período: de 15 a 20 de julho de 2002.

Visita de colaboração científica.
Friedrich-Schiller-Universität, Jena, Alemanha.
Período: de 1º a 13 de outubro de 2002.

Nei Fernandes de Oliveira Jr.

Visita à Criogenics Ltd., Inglaterra.

Período: de 06 a 07 de maio de 2002.

Visita de colaboração científica.

Universidade de Leiden, Leiden, Holanda.

Período: de 08 a 11 de maio de 2002.

Visita de colaboração científica.

Tufts University, EUA.

Período: de 13 a 16 de maio de 2002.

Visita de colaboração científica.

Tufts University, EUA.

Período: de 28 a 31 de agosto de 2002.

Renato de Figueiredo Jardim

Visita de colaboração científica.

National High Magnetic Field Laboratory - NHMFL, Los Alamos, EUA.

Período: de 02 a 10 de dezembro de 2002.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Visita de colaboração científica.

Centro de Física da Matéria Condensada da Universidade de Lisboa, Lisboa, Portugal.

Período: de 07 de janeiro a 04 de fevereiro de 2002.

Reunião do Comitê Assessor de Física/Astronomia, CNPq.

Reunião com o grupo de trabalho de Físicos no Ministério da Ciência e Tecnologia, Brasília, DF.

Data: 26 de fevereiro a 02 de março de 2002.

Visita de colaboração científica.

Grupo do Prof. Jean-Louis Rivail da Université Henri Poincaré, Nancy, França.

Período: de 12 a 15 de março de 2002.

Visita de colaboração científica.

Indian Association for the Cultivation of Sciences, Calcutá, Índia.

Período: de 17 a 19 de março de 2002.

Reunião no CNPq com a finalidade de analisar os processos de fluxo contínuo, Brasília, DF.

Data: 12 de abril de 2002.

Reunião da Comissão de Física Brasileira no Ministério da Ciência e Tecnologia, Brasília, DF.

Período: de 13 a 14 de maio de 2002.

Reunião do Comitê Assessor de Física/Astronomia, CNPq, Brasília, DF.

Período: de 06 a 07 de junho de 2002.

Reunião da Comissão de Física Brasileira no Ministério da Ciência e Tecnologia, Brasília, DF.

Período: de 19 a 21 de junho de 2002.

Comitê externo de seleção dos candidatos inscritos no Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC/CNPq/Universidade de Moji das Cruzes - UMC), Moji das Cruzes, SP.

Período: de 27 a 28 de junho de 2002.

Conselho da Sociedade Brasileira de Física na 54^a Reunião da SBPC, Goiânia, Go.

Período: de 11 a 12 de julho de 2002.

Reunião do CERN/CNPq, no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, RJ.

Data: 12 de agosto de 2002.

Reunião do Comitê Assessor de Física/Astronomia, CNPq, Brasília, DF.

Data: 28 de agosto de 2002.

Reunião do CNPq, Brasília, DF.

Período: de 15 a 16 de outubro de 2002.

Reunião do Comitê Assessor de Física/Astronomia, CNPq, Brasília, DF.

Período: de 24 a 29 de novembro de 2002.

Reunião do Comitê Assessor de Física/Astronomia, CNPq, Brasília, DF.

Data: 05 de dezembro de 2002.

Visita de colaboração científica.

Grupo do Prof. Benedito Cabral da Universidade de Lisboa, Lisboa, Portugal.

Período: de 18 de dezembro de 2002 a 1^o de fevereiro de 2003.

4e - Participação em Reuniões Científicas Internacionais:

Adalberto Fazzio

2nd International Conference on Physics and Application of Spin Related Phenomena in Semiconductors - PASPS.

Würzburg, Alemanha.

Período: de 23 a 26 de julho de 2002.

26th International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS.
Edinburgh, Escócia.

Período: de 29 de julho a 02 de agosto de 2002.

André Bohomoletz Henriques

1st Meeting of the Sociedade Brasileira de Pesquisa em Materiais - SBPMat.
Rio de Janeiro, RJ.

Período: de 07 a 10 de julho de 2002.

15th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics.
Oxford, Inglaterra.

Período: de 05 a 09 de agosto de 2002.

Antônio Domingues dos Santos

Workshop Trends on Nanostructured Magnetic Materials.
Rio de Janeiro, RJ.

Período: de 21 a 23 de outubro de 2002.

Antônio José Roque da Silva

2nd International Conference on Physics and Application of Spin Related Phenomena
in Semiconductors - PASPS.

Würzburg, Alemanha.

Período: de 23 a 26 de julho de 2002.

26th International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS.
Edinburgh, Escócia.

Período: de 29 de julho a 02 de agosto de 2002.

Gerardo Fabián Goya

INTERMAG Europe 2002.
Amsterdam, Holanda.

Período: de 28 de abril a 02 de maio de 2002.

47th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials - MMM'2002.
Florida, EUA.

Período: de 10 a 17 de novembro de 2002.

Guennadii Michailovich Gusev

26th International Conference on the Physics of Semiconductors.
Edinburgh, Escócia.

Período: 29 de julho a 02 de agosto de 2002.

15th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics.
Oxford, Inglaterra.

Período: de 05 a 09 de agosto de 2002.

Helena Maria Petrilli

Workshop “En las Fronteras de la Materia Condensada - FMC02”, dedicado a Mariana Weissmann.

Buenos Aires, Argentina.

Período: de 19 a 21 de dezembro de 2002.

Hercílio Rodolfo Rechenberg

International Symposium on Metal-Hydrogen Systems.

Annecy, França.

Período: de 02 a 06 de setembro de 2002.

José Roberto Leite

International Workshop on Bulk Nitride Semiconductors.

Manaus, AM.

Período: de 18 a 23 de maio de 2002.

International Workshop on Nitride Semiconductors.

Aachen, Alemanha.

Período: de 22 a 25 de julho de 2002.

26th International Conference on the Physics of Semiconductors.

Edinburgh, Escócia.

Período: 29 de julho a 02 de agosto de 2002.

24th General Assembly 2002 of the International Union of Pure and Applied Physics.

Berlin, Alemanha.

Período de 05 a 13 de outubro de 2002.

4th International Conference on Low Dimensional Structures and Devices - LDSD2002.

Fortaleza, Ceará.

Período: de 07 a 14 de dezembro de 2002.

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

International Workshop on Nitride Semiconductors.

Aachen, Alemanha.

Período: de 22 a 25 de julho de 2002.

26th International Conference on the Physics of Semiconductors.

Edinburgh, Escócia.

Período: 29 de julho a 02 de agosto de 2002.

4th International Conference on Low Dimensional Structures and Devices - LDSD2002.

Fortaleza, Ceará.

Período: de 07 a 14 de dezembro de 2002.

Nei Fernandes de Oliveira Junior

23rd International Conference on Low Temperature Physics.

Hiroshima, Japão.

Período: de 22 a 27 de agosto de 2002.

Sônia Frota-Pessôa

Workshop on Electronic Structure of Condensed Matter I.

Tagernsee, Alemanha.

Período: maio de 2002.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Current Developments in Atomic, Molecular and Chemical Physics Conference – CDAMCP.

New Delhi, Índia.

Período: de 20 a 22 de março de 2002.

8^a Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica.

Juiz de Fora, MG.

Data: 14 de julho de 2002.

XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina - QUITEL 2002.

Montevideo, Uruguai.

Período: de 1^o a 08 de setembro de 2002.

Workshop on New Concepts and Applications of Physical Organic Chemistry, Instituto de Química da Universidade Federal Fluminense.

Rio de Janeiro, RJ.

Período: de 21 a 24 de outubro de 2002.

XX Encontro de Físicos do Norte e Nordeste, Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco.

Recife, PE.

Período do afastamento: de 06 a 10 de novembro de 2002.

Valdir Bindilatti

23rd International Conference on Low Temperature Physics.

Hiroshima, Japão.

Período: de 22 a 27 de agosto de 2002.

4f - Participação em Reuniões Científicas Nacionais:

Adalberto Fazzio

XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
Caxambu, MG.
Período: de 07 a 11 de maio de 2002.

André Bohomoletz Henriques

XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
Caxambu, MG.
Período: de 08 a 10 de maio de 2002.

Antônio Domingues dos Santos

XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
Caxambu, MG.
Período: de 07 a 11 de maio de 2002.

Antônio José Roque da Silva

XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
Caxambu, MG.
Período: de 07 a 11 de maio de 2002.

Carmen Silvia de Moya Partiti

XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
Caxambu, MG.
Período: de 07 a 11 de maio de 2002.

Ewout Ter Haar

XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
Caxambu, MG.
Período: de 07 a 11 de maio de 2002.

Gerardo Fabián Goya

XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
Caxambu, MG.
Período: de 07 a 11 de maio de 2002.

Guennadii Michailovich Gusev

1º Encontro de Nanodispositivos Semicondutores e Materiais Nanoestruturados.
Recife, PE.
Período: de 20 a 23 de março de 2002.

Helena Maria Petrilli

1ª Reunião de Trabalho do Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos.
Atibaia, SP.
Período: de 23 a 28 de março de 2002.

Hercílio Rodolfo Rechenberg

XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

Caxambu, MG.

Período: de 07 a 11 de maio de 2002.

José Roberto Leite

1º Encontro de Nanodispositivos Semicondutores e Materiais Nanoestruturados.

Recife, PE.

Período: de 20 a 24 de março de 2002.

Workshop de Novos Projetos e Comemoração dos 40 Anos do Centro Latino Americano de Física - CLAF, Rio de Janeiro, RJ.

Período: de 25 a 27 de março de 2002.

XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

Caxambu, MG.

Período: de 07 a 11 de maio de 2002.

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

1º Encontro de Nanodispositivos Semicondutores e Materiais Nanoestruturados.

Recife, PE.

Período: de 20 a 24 de março de 2002.

XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

Caxambu, MG.

Período: de 07 a 11 de maio de 2002.

Renato de Figueiredo Jardim

XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

Caxambu, MG.

Período: de 07 a 11 de maio de 2002.

Valdir Bindilatti

XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

Caxambu, MG.

Período: de 07 a 11 de maio de 2002.

4g - Prêmio Recebido:

Renato de Figueiredo Jardim

Trabalho Premiado como o Melhor Poster na Área de Magnetismo.

“Propriedades de Compostos $Nd_{0.5}Ca_{0.5}Mn_{1-x}Cr_xO_3$ ”.

CARNEIRO, A.S.; FONSECA, F.C. e JARDIM, R.F.

XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

Caxambu, MG.

Período: de 07 a 11 de maio de 2002.

5 - PRODUÇÃO CIENTÍFICA

5a - Trabalhos Apresentados em Eventos Internacionais:

1. ALVES, H.W.L.; ALVES, J.L.A.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Ab Initio Calculation of the Dynamical Properties of GaAs and GaN (110) and (100) Surfaces". In: *26th International Conference on the Physics of Semiconductors*, Edinburgh, Escócia, de 29 de Julho a 02 de agosto de 2002.
2. ANJOS, V.; LEÃO, S.A. and LEITE, J.R. - "Resonant Inelastic Light Scattering by Elementary Excitations in 2D Gated Electron Gas". In: *26th International Conference on the Physics of Semiconductors*, Edinburgh, Escócia, de 29 de julho a 02 de agosto de 2002.
3. ANTONELLI, A; JUSTO, J.F. and FAZZIO, A. - "Effects of Dislocations on the Segregation and Diffusion of As Impurities in Si". In: *26th Internacional Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS26)*, Edinburgh, Escócia, de 29 de julho a 02 de agosto de 2002.
4. BARBOSA, K.O.; ASSALI, L.V.C.; MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F. - "Structural and Electronic Properties of Fi Impurities in SiC: an Ab Initio Investigation". In: *II Workshop on Computational Materials Science*, Sardenha, Itália, de 23 a 29 de setembro de 2002.
5. BYKOV, A.A.; GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; BAKAROV, A.K.; GORAN, A.V.; KUDRYASHEV, V.M. and TOROPOV, A.I. - "Quasiclassical Negative Magnetoresistance of a Two-Dimensional Electron Gas in a Spatially Random Magnetic field". In: *26th International Conference on the Physics of Semiconductors*, Edinburgh, Escócia, de 29 de Julho a 02 de agosto de 2002.
6. CANUTO, S. - "Hydrogen Bonds in Explicit Liquid Environment using a Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Methodology". In: *XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina - QUITEL 2002*, Montevideo, Uruguai, de 02 a 08 de setembro de 2002.
7. CANUTO, S. - "Monte Carlo-Quantum Mechanics Studies of Molecules in Solution". "Current Developments in Atomic, Molecular and Chemical Physics". In: *Conference on Current Developments in Atomic, Molecular and Chemical Physics with Applications - CDAMCP*, New Delhi, Índia, de 20 a 22 de março de 2002.
8. CARNEIRO, A.S.; FONSECA, F.C.; JARDIM, R.F. and KIMURA, T. - "Phase Coexistence in Cr-doped Nd_{0.5} Ca_{0.5} MnO₃ Compounds". In: *47th*

Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials - MMM'02, Tampa, Florida, EUA, de 02 a 06 de dezembro de 2002.

9. CAVALHEIRO; SILVA, E.C.F. da; QUIVY, A.A.; TAKAHASHI; E.K.; MARTINI, S.; MENESES, E.A. and LEITE, J.R. - "Influence of Illumination on the Quantum Mobility of a Two-Dimensional Electron Gas in Si δ -Doped GaAs/InGaAs Quantum Wells". In: *4th International Conference on Low Dimensional Structures and Devices*, Fortaleza, Ceará, de 08 a 13 de dezembro de 2002.
10. COAQUIRA, J.A.H.; RECHENBERG, H.R.; MESTNIK-FILHO, J. and CARBONARI, A.W. - "Structural, Magnetic and Hyperfine Properties of Zr(Cr_{1-x}Fe_x)₂ hydrides". In: *International Symposium on Metal Hydrogen Systems - Fundamental and Applications*, Annecy, França, de 02 a 06 de setembro de 2002.
11. DALPIAN, G.M.; FAZZIO, A. and SILVA, A.J.R. da - "Adsorption of Si and Ge on Si(100) Terraces and Steps". In: *26th International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS26*, Edinburgh, Escócia, 29 de julho a 02 de agosto de 2002.
12. DÍAZ-AGUILA, C.; LLÁNES-LAZO, F.; RECHENBERG, H.R. and GOYA, G.F. - "Magnetic Nanoparticles in Alginate Matrix". In: *First Meeting of the Sociedade Brasileira de Pesquisa em Materiais - SBPMat.*, Rio de Janeiro, RJ, de 07 a 10 de julho de 2002.
13. DUARTE, C.A.; SILVA, E.C.F. da; QUIVY, A.A.; SILVA, M.J. da; MARTINI, S.; MENESES, E.A.; LAURETTO, E. and LEITE, J.R. - "Influence of the Temperature on the Carrier Capture into Self-Assembled InAs/GaAs Quantum Dots". In: *4th International Conference on Low Dimensional Structures and Devices*, Fortaleza, Ceará, de 08 a 13 de dezembro de 2002.
14. ESCOTE, M.T.; CAMPO, J. e JARDIM, R.F. - "Structural and Transport Properties of Polycrystalline Nd_{1-x}Eu_xNiO₃ Samples". In: *First Meeting of the Sociedade Brasileira de Pesquisa em Materiais - SBPMat.*, Rio de Janeiro, RJ, de 07 a 10 de julho de 2002.
15. FONSECA, F.C.; GOYA, G.F.; JARDIM, R.F.; CARREÑO, N.L.V.; LONGO, E.; LEITE, E.R. and MUCCILLO, R. - "Magnetic Properties of Ni:SiO₂ Nanocomposites Synthesized by a Modified Sol-Gel Method". In: *47th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials - MMM'02*, Tampa, Florida, EUA, de 02 a 06 de dezembro de 2002.
16. FONSECA, F.C.; SOUZA, J.A.; JARDIM, R.F.; MUCCILLO, R.; MUCCILLO, E.N.S.; GOUVEA, D.; JUNG, M.H. and LACERDA, A.H. - "Transport Properties of La_{0.6} Y_{0.1} Ca_{0.3} MnO₃ Compounds with Different Interfaces". In: *VIII Electroceramics*, Rome, Italy, de 25 a 28 de agosto de 2002.

17. FURTHMÜLLER, J.; RAMOS, L.E.; BECHSTEDT, F.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Carbon-Based Defects in GaN: Doping Behaviour". In: *International Workshop on Nitride Semiconductors*, Aachen, Alemanha, de 22 a 25 de julho de 2002.
18. GOYA, G.F. - "Magnetic Dynamics of Zn⁵⁷Fe₂O₄ Nanoparticles Dispersed in a ZnO Matrix". In: *Intermag Europe 2002*, Amsterdã, Holanda, de 28 de abril a 02 de maio de 2002.
19. GOYA, G.F.; FONSECA, F.C.; JARDIM, R.F.; MUCCILLO, R.; CARREÑO, N.L.V.; LONGO, E. and LEITE, E.R. - "Magnetic Properties of Ni Nanoparticles Embedded in Amorphous SiO₂". In: *Fall Meeting of the Materials Research Society*, Boston, EUA, de 02 a 06 de dezembro de 2002.
20. GOYA, G.F.; FONSECA, F.C.; JARDIM, R.F.; MUCCILLO, R.; CARREÑO, N.L.V.; LONGO, E. and LEITE, E.R. - "Magnetic Dynamics of Single-Domain Ni Nanoparticles". In: *47th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials - MMM'02*, Tampa, Florida, EUA, de 02 a 06 de dezembro de 2002.
21. GRATENS, X.; BINDILATTI, V.; OLIVEIRA Jr., N.F. and GOLACKI, Z. - "Low Temperature Magnetization of Pb_{1-x}Ce_xTe". In: *23rd International Conference on Low Temperature Physics*, Hiroshima, Japão, de 22 a 27 de agosto de 2002.
22. GRATENS, X.; BINDILATTI, V.; OLIVEIRA Jr., N.F. and GOLACKI, Z. - "Low Temperature Magnetization and Exchange Interaction in Sn_{1-x}Gd_xTe". In: *23rd International Conference on Low Temperature Physics*, Hiroshima, Japão, de 22 a 27 de agosto de 2002.
23. GUSEV, G.M.; ESTIBALS, O.; KVON, Z.D. and PORTAL, J.C. - "Magnetoresistance in a Parallel Magnetic Field and Fermi liquid Constant in the Strongly Correlated Disordered Electron System". In: *15th International Conference on High Magnetic Field in Semiconductor Physics*, Oxford, Inglaterra, de 05 a 09 de agosto 2002.
24. GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; LEITE, J.R.; BAKAROV, A.K.; TOROPOV, A.I.; ESTIBALS, O. and PORTAL, J.C. - "Magnetotransport of a Quasi-Three-Dimensional Electron Gas in the Lowest Landau Level". In: *15th International Conference on High Magnetic Field in Semiconductor Physics*, Oxford, Inglaterra, de 05 a 09 de agosto 2002.
25. GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; LEITE, J.R.; ESTIBALS, O. and PORTAL, J.C. - "Subband Spectrum and Quantum Hall Effect in Wide Parabolic Quantum Well". In: *15th International Conference on High Magnetic Field in Semiconductor Physics*, Oxford, Inglaterra, de 05 a 09 de agosto 2002.

26. HANAMOTO, L.K.; HENRIQUES, A.B.; OLIVEIRA JR., N.F.; OLIVEIRA RAPPL, P.H. de; UETA, A.Y. and ABRAMOT, E. - “Magneto-optical Studies of the Eu Te Heterostructures”. In: *First Meeting of the Sociedade Brasileira de Pesquisa em Materiais - SBPMat.*, Rio de Janeiro, RJ, de 07 a 10 de julho de 2002.
27. HENRIQUES, A.B.; MARTIN, R.V.; OLIVEIRA JR., N.F.; HALES, V.; NICOLAS, R.J. and MASON, N.J. - “Quenching of Miniband Conduction in InAs/GaSb Superlattices in High Magnetic Fields”. In: *15th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics*, Oxford, Inglaterra, de 03 a 10 de agosto de 2002.
28. HENRIQUES, A.B.; MARTIN, R.V.; OLIVEIRA JR., N.F.; BROADLEY, V.J.; NICOLAS, R.J. and MASON, N.J. - “Supression of Vertical Conduction in In As/GaSb Superlattices induced by a High Magnetic Field”. In: *First Meeting of the Sociedade Brasileira de Pesquisa em Materiais - SBPMat.*, Rio de Janeiro, RJ, de 07 a 10 de julho de 2002.
29. HUAMANTINCO, A.R. and PETRILLI, H.M. - “Au(111) and CH₃S adsorbed on Au(111) with the PAW Method” In: *Workshop “En las Fronteras de La Materia Condensada (dedicado à Mariana Weissman)”*, Buenos Aires, Argentina, de 19 a 21 de dezembro de 2002.
30. HUSBERG, O.; KARTCHENKO, A.; LI, S.F.; SALAZAR, D.G.P.; AS, D.J.; LISCHKA, K.; SILVEIRA, E.; NORIEGA, O.C.; FERNANDEZ, J.R.L. and LEITE, J.R. - “The Origin of Light Emission from Quantum-Dot-Like Structures in Cubic-GaN/ InGaN Double Heterostructures”. In: *International Workshop on Nitride Semiconductors*, Aachen, Alemanha, de 22 a 25 de julho de 2002.
31. JARDIM, R.F. - “Metal Insulator Transition in RNiO₃ and Related Solid Solutions”. Invited Talk. In: *First Meeting of the Sociedade Brasileira de Pesquisa em Materiais - SBPMat.*, Rio de Janeiro, RJ, de 07 a 10 de julho de 2002.
32. JUSTO, J.F.; ASSALI, L.V.C. and NUNES, R.W. - “Microscopic Structure of the 90° and 30° Partial Dislocations in Gallium Arsenide”. In: *9th International Conference on Extended Defects in Semiconductors*, Bologna, Itália, de 1° a 06 de junho de 2002.
33. KLAUTAU, A.B. and FROTA-PESSÔA, S. - “Magnetism of Co Clusters Embedded in Cu(001) Surfaces: An Ab Initio Study”. In: *Workshop on Electronic Structure of Condensed Matter I*, Tagernsee, Alemanha, maio de 2002.
34. KVON, Z.D.; ESTIBALS, O.; GUSEV, G.M. and PORTAL, J.C. - “Nonmonotonic Conductivity Corrections in 2D Electron System near (111) Silicon Surface: Signiture of the Possible Ferromagnetic Order”. In: *26th*

International Conference on the Physics of Semiconductors, Edinburgh, Escócia, de 29 de Julho a 02 de agosto de 2002.

35. LARICO, R.; ASSALI, L.V.C.; MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F. - "Nickel Impurities in Diamond: a FP-LAPW Investigation". In: *II Workshop on Computational Materials Science*, Sardenha, Itália, de 23 a 29 de setembro de 2002.
36. MASCARENHAS, Y.P.; SILVA, A.M.; PARTITI, C.S.M. and BRINATTI, A.M. - "Quantitative Determination of the Mineralogical Constitution of a Brazilian soil". In: *XIX Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography*, Geneva, Suíça, de 06 a 15 de agosto de 2002.
37. MOTA, R.; FAGAN, S.B.; BAIERLE, R.J.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Functionalization of Carbon Nanotubes Through the Binding of Atoms and Molecules to a Silicon Substitutional Impurity". In: *26th International Conference on the Physics of Semiconductors - CPS26*, Edinburgh, Escócia, de 29 de julho a 02 de agosto de 2002.
38. NORIEGA, O.C.; LEITE, J.R.; MENESES, E.A; RODRIGUES, S.C.P.; SCOLFARO, L.M.R.; SIPAHI, G.M.; KOHLER, U.; AS, D.J.; POTTHAST, S.; KARTCHENKO, A. and LISCHKA, K. - "Photoluminescence and Photoreflectance Characterization of Cubic GaN/AlGaIn Quantum Wells". In: *International Workshop on Nitride Semiconductors*, Aachen, Alemanha, de 22 a 25 de julho de 2002.
39. NUNES, R.W.; ASSALI, L.V.C. and JUSTO, J.F. - "Ab Initio Investigation on the Dislocation Core Properties in Zinc-Blende Semiconductors". In: *XII Workshop on Computational Materials Science*, Sardenha, Itália, de 23 a 29 de setembro de 2002.
40. OLIVEIRA R.F.; HANAMOTO, L.K.; HENRIQUES, A.B.; SOUZA, P.L. and YAVICH, EB. - "Luminescence from Extended and Localized States in Doped Interlattices in High Magnetic Fields". In: *15th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics*, Oxford, Inglaterra, de 03 a 10 de agosto de 2002.
41. ORELLANA, W.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Spin Effects on the Oxidation Process in SiO₂". In: *26th International Conference on the Physics of Semiconductors - CPS26*, Edinburgh, Escócia, de 29 de julho a 02 de agosto de 2002.
42. PALACIO, F.; CAMPO, J.; BECERRA, C.C.; PADUAN FILHO, A. and DEFOTIS., G.C. - "Field-Induced Critical Fluctuations in a Molecular Ferrimagnet in the Vicinity of T_c". In: *International Conference on Molecule-Based Magnet*, Zaragoza, Espanha, de 07 a 10 de outubro de 2002.
43. PEREIRA, T.A.S.; FREIRE, J.A.K.; FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R. and SILVA Jr., E.F. da - "Confined Excitons in SrTiO₃/Si/SrTiO₃ Quantum Wells". In: *4th International*

Conference on Low Dimensional Structures and Devices, Fortaleza, Ceará, de 08 a 13 de dezembro de 2002.

44. SCOLFARO, L.M.R.; MARQUES, M.; TELES, L.K.; ANJOS, V.; FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A.; SILVA JR., E.F. da and LEITE, J.R. - “Ab Initio Calculations of Electronic and Dielectric Properties of Cubic SrTiO₃”. In: *26th International Conference on the Physics of Semiconductors*, Edinburgh, Escócia, 29 de julho a 02 de agosto de 2002.
45. SCOLFARO, L.M.R.; RODRIGUES, S.C.P.; SIPAHI, G.M.; NORIEGA, O.C. and LEITE, J.R. - “Kp Calculations of Electronic and Optical Properties in p-Doped (001) AlGa_N/Ga_N Thin Superlattices”. In: *International Workshop on Nitride Semiconductors*, Aachen, Alemanha, de 22 a 25 de julho de 2002.
46. SILVA, E.Z. da; NOVAES, F.D.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - “Computer Simulations of Gold Nanowires”. In: *26th International Conference on the Physics of Semiconductors - CPS26*, Edinburgh, Escócia, de 29 de julho a 02 de agosto de 2002.
47. SILVA; M.J. da; MARTINI, S.; LAMAS; T.E.; QUIVY; A.A.; SILVA, E.C.F. da and LEITE, J.R. - “Optical Properties of InAs/GaAs Quantum Dots Emitting Beyond 1.3 μm”. In: *4th International Conference on Low Dimensional Structures and Devices*, Fortaleza, Ceará, de 8 a 13 de dezembro de 2002.
48. SILVEIRA, E.; SANTOS, A.M.; LEITE, J.R.; SILVA, E.C.F. da; NORIEGA, O.C.; HUSBERG, O.; AS, D.J.; SCHIKORA, D.; LISCHKA, K.; MENESES, E.A.; RIBEIRO, E. and LEITE ALVES, H.W. - “Vibrational Properties of Cubic In_xGa_{1-x}N Structures”. In: *26th International Conference on the Physics of Semiconductors*, Edinburgh, Escócia, de 29 de julho a 02 de agosto de 2002.
49. SOCOLOVSKY, L.M.; DENARDIN, J.C.; BRANDL, A.L.; KNOBEL, M. and GOYA, G.F. - “Mössbauer Investigation of Fe-SiO₂ Granular Alloys”. In: *First Meeting of the Sociedade Brasileira de Pesquisa em Materiais - SBPMat.*, Rio de Janeiro, RJ, de 07 a 10 de julho de 2002.
50. SOTOMAYOR CHOQUE, N.M.; GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; BYKOV, A.A.; LITVIN, L.V.; MOSHEGOV, N.T.; TOROPOV, A I. and PORTAL, J.C. - “Electron Dynamics in a Quasi-Three-Dimensional Electron Billiard System”. In: *26th International Conference on the Physics of Semiconductors*, Edinburgh, Escócia, de 29 de Julho a 02 de agosto de 2002.
51. TABATA, A.; OLIVEIRA, J.B.B.; MARTINI, S.; QUIVY, A.A. and LEITE, J.R. - “Anti-Stokes Photoluminescence in High Quality InGaAs/GaAs Single Quantum Well”. In: *26th International Conference on the Physics of Semiconductors*, Edinburgh, Escócia, de 29 de julho a 02 de agosto de 2002.
52. TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; FURTHMÜLLER, J.; BECHSTEDT, F. and LEITE, J.R. - “Phase Separation, Gap Bowing, and Structural Properties

of Cubic $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ ". In: *International Workshop on Nitride Semiconductors*, Aachen, Alemanha, de 22 a 25 de julho de 2002.

53. VENEZUELA, P.; DALPIAN, G.M.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Vacancy-Mediated Diffusion in Disordered Alloys: Ge Self-Diffusion in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ". In: *26th International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS26*, Edinburgh, Escócia, de 29 de julho a 02 de agosto de 2002.

5b - Trabalhos Apresentados em Eventos Nacionais:

1. ALVES, H.W.L.; ALVES, J.L.A.; SCOLFARO, L.M.R. e LEITE, J.R. - "Ab Initio Calculation of the Dynamical and Thermodynamical Properties of BP and InN". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
2. ANJOS, V.C.; LEITE, J.R. e LEÃO, S.A. - "Elementary Excitations of 2D Gated Electron Gas". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
3. AYRES, F. e ASSALI, L.V.C. - "Properties of HgI_2 and AnI_2 ". In: *VIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica*, Juiz de Fora, MG, de 14 a 18 de julho de 2002.
4. CARNEIRO, A.S.; FONSECA, F.C. e JARDIM, R.F. - "Propriedades de Compostos $\text{Nd}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ ". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
5. CASAGRANDE, D. e FERRAZ, A.C. - "The Electronic Structure of Si(111)-(1x1)Cl Investigated by Planar Charge Density Method". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
6. CASAGRANDE, D. e FERRAZ, A.C. - "Theoretical Calculations for Si(111)-(2x1)Cl". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
7. CASTRO, G.M.B.; ARAÚJO, A.E.P. de; RODRIGUES, A.R.; MACHADO, F.L.A.; JARDIM, R.F. e NIGAM, A.K. - "Medidas de Magnetoimpedância nas Manganitas $\text{La}_{0.6}\text{Y}_{0.1}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ e $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ ". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
8. CASTRO, G.M.B.; RODRIGUES, A.R.; MACHADO, F.L.A.; JARDIM, R.F. e NIGAM, A.K. - "Medidas de Magnetoimpedância em Manganitas". In: *XX Encontro de Físicos do Norte Nordeste*, Recife, PE, de 04 a 08 de novembro de 2002.

9. CHOQUE, F.M.M. e GOYA, G.F. - “Caracterização Estrutural e Magnética do Sulfoespínélio FeCr_2S_4 obtido por meio de Mecanosíntese.”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
10. CHOQUE, N.M.S.; GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; BIKOV, A.A.; BAKAROV, A.K.; TOROPOV, A.I. e MOSHEGOV, N.T. - “Boundary Roughness Scattering in the Resistivity of wide Quantum Wells”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
11. CHOQUE, N.M.S.; GUSEV, G.M.; LEITE, J.R. BIKOV, A.A.; LITVIN, L.V.; MOSHEGOV, N.T.; TOROPOV, A.I.; STIBALS, O. e PORTAL, J.C. - “Evolution of Commensurability Oscillations as a Function of Electric Field in Arrays of Antidotes”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
12. CHOQUE, N.M.S.; GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; OLSHANETSKY, E.B.; PLOTNIKOV, A.V.; MOSHEGOV, N.T.; TOROPOV, A.I. - “Chaotic Electron Dynamics in a Quasi-Three-Dimensional Billiard”. “In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
13. CHOQUE, N.M.S.; GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; OLSHANETSKY, E.B.; PLOTNIKOV, A.V.; MOSHEGOV, N.T. e TOROPOV, A.I. - “Enhanced Quantum Oscillations in Antidot Lattice in 2DEG under Strong DC Electric Field”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
14. DALPIAN, G.M.; FAZZIO, A. e SILVA, A.J.R. da- “Theoretical STM Images of Ge Adsorption on Si(100)”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
15. DALPIAN, G.M.; SILVA A.J.R. da; VENEZUELA P. e FAZZIO, A. - “Si Incorporation in Si(100) Steps”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
16. DALPIAN, G.M.; VENEZUELA, P; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - “Theoretical Study of Vacancies in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
17. DAVILA, L.Y.A.; PETRILLI, H.M.; CALDAS, M.J. e GALVÃO, D.S. - “Comparação de Métodos Ab Initio em Sistemas Cristalinos do Poliparafenileno” In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
18. ESCOTE, M.T. e JARDIM, R.F. - “Estudo das Propriedades Físicas dos Compostos $\text{Nd}_{1-x}\text{Eu}_x\text{NiO}_3$ ”. In: *XV Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências dos Materiais*, Natal, RN, de 09 a 13 de novembro de 2002.

19. ESCOTE, M.T.; JARDIM, R.F. e CAMPO, J. - “Metal-Insulator Transition in $\text{Nd}_{1-x}\text{Eu}_x\text{NiO}_3$ Compounds”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
20. FAGAN, S.B.; MOTA, R.; BAIERLE, R.J.; SILVA, A.J.R. da. e FAZZIO, A. - “Adsorption of Atoms and Molecules on Silicon-Doped Carbon Nanotubes”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
21. FAGAN, S.B.; MOTA, R.; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - “Ab Initio Study of Iron Atoms Interacting with Carbon Nanotubes”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
22. FARIA, J.C.; SILVA, E.Z. da; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - “Gold Atoms Adsorbed on Carbon Nanotubes”. In: *VIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica*, Juiz de Fora, MG, de 14 a 18 de julho de 2002.
23. FILETI, E.; RIVELINO, R. e CANUTO, S. - “Caracterização dos Efeitos de Ligação de Hidrogênio na Depolarização do Espalhamento Rayleigh por Aglomerados Moleculares”. In: *VIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica*, Juiz de Fora, MG, de 14 a 18 de julho de 2002.
24. FONSECA, F.C.; GOYA, G.F.; JARDIM, R.F.; MUCCILLO, R.; CARREÑO, N.L.V.; LONGO, E. e LEITE, E.R. - “Superparamagnetism and Magnetic Properties of Amorphous SiO_2 -Coated Ni Nanoparticles”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
25. FONSECA, F.C.; SOUZA, J.A.; JARDIM, R.F.; MUCCILLO, R.; MUCCILLO, E.N.S.; GOUVEA, E.; JUNG, M.H e 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 Concentrations”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
26. FRANCO, D.R.; BERQUÓ, T.S.; PARTITI, C.S.M.; IMBERNON, R. e ENZWEILER, J. - “Caracterização de Sedimentos da Barragem de Taiapuêba - SP: Um Estudo de Magnetismo Ambiental por Espectroscopia Mössbauer”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
27. GOYA, G.F. e SAGREDO, V. - “Transição Spin-Glass e Parâmetros Críticos no Sistema $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{In}_2\text{Te}_4$ ”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
28. HANAMOTO, L.K.; HENRIQUES, A.B.; SOUZA, P.L.; TRIBUZY, C.V. e YAVICH, B. - “Caracterização de Interfaces em Hetero-estruturas In P / In

- GaAs”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
29. HUAMANTICO, A.R.; KLAUTAU, A.B. e PETRILLI, H.M. - “Superfícies Metálicas por meio de Cálculos Ab Initio” In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
30. HUAMANTICO, A.R. e PETRILLI, H.M. - “Cálculos de Dinâmica Molecular Ab Initio de Au(111) e de CH₃S absorvido em Au(111) In: *VIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica*, Juiz de Fora, MG, de 14 a 18 de julho de 2002.
31. JESUS, D.R. e PARTITI, C.S.M. - “Propriedades Magnéticas e Estruturais das Ligas Al_xFe_{78-x}Si₉B₁₃ Produzidas por Mecanossíntese”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
32. LARICO, R. e ASSALI, L.V.C. - “Physical Properties of Ni Impurities in Diamond” In: *VIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica*, Juiz de Fora, MG, de 14 a 18 de julho de 2002.
33. LUDWIG, V.; CANUTO, S. e BORIN, A.C. - “Estudo Teórico do Efeito de Solvente na Molécula 1H-Benzotriazol”. In: *VIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica*, Juiz de Fora, MG, de 14 a 18 de julho de 2002.
34. MALASPINA, T.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - “Estudo Clássico-Quântico de Ligações de Hidrogênio em Meio Líquido: Piridina em Solução Aquosa”. In: *VIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica*, Juiz de Fora, MG, de 14 a 18 de julho de 2002.
35. MARQUES, M.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R. e LEITE, J.R. - “Estudo Teórico de Ligas Quaternárias de Nitretos do Grupo-III”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
36. MÁRQUEZ, A.M.O. Z.; LEITE, J.R.; TABATA, A.; AS, D.J.; SCHIKORA, D. e LISCHKA, K. - “Fotoluminescência de Filmes Epitaxiais de GaN Cúbico Copado com Mg e Si”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
37. MARTINS, A.; FANTINI, M.C.A. e SANTOS, A.D. - “Influência da Temperatura de Deposição e do Tipo de Substrato na Obtenção das Propriedades Estruturais e Magnéticas de Filmes de FePt”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada* Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
38. MEZA, V.A. e JARDIM, R.F. - “Preparation and Characterization Nd_{1.5}Ce_{0.5}Sr₂Cu₂MO₁₀ (M=Nb, Ta) Compounds”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.

39. MIOTTO, R.; KISS, F.D. e FERRAZ, A.C. - "A Theoretical Study of the Oxygen Adsorption on CdTe(110)". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
40. MORBEC, F.M.O.; MIWA, R.H.; MIOTTO, R. e FERRAZ, A.C. - "ZnSe/Te/GaAs(001) Interface: An Ab Initio Study". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
41. MOTA, F.B. e FAZZIO, A. - "First Principles Investigations of Electronic and Structural Properties of the β -Si₃N₄(001) Surface". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
42. NOVAES, F.D.; FAZZIO, A.; SILVA, A.J.R. da e SILVA, E.Z. da - "Cálculos Ab Initio de um Nanofio de Ouro". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
43. NOVAES, F.D.; FAZZIO, A.; SILVA, A.J.R. da e SILVA, E.Z. da - "Cálculos Ab Initio de um Nanofio de Ouro". In: *VIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica*, Juiz de Fora, MG, de 14 a 18 de julho de 2002.
44. NUNES, O.A.C.; FONSECA, A.L.A.; FANYAO, QU; DAUD, S.P. e LEITE, J.R. - "2D-3D Transition in a Parabolic Quantum Well". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
45. OLIVEIRA, R.F.; HENRIQUES, A.B.; SOUZA, P.L. e YAVICH, B. - "Níveis de Landau e Fotoluminescência de Super-redes In GaAs / In P tipo n". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
46. ORELLANA, W.; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - "Spin Effects on the Oxidation Process in SiO₂". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
47. ORELLANA, W.; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - "Spin Effects on the Oxidation Process at the Si/SiO₂ Interface". In: *VIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica*, Juiz de Fora, MG, de 14 a 18 de julho de 2002.
48. PERIPOLLI, S.B.; MOTA, R.; SILVA, C.R.S. da e FAZZIO, A. - "The Role Played by Vacancies in the Silicon Crystal-Amorphous Transition". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
49. PODEROSO, F.C. e SILVA, A.J.R. da - "Autodifusão na Liga Desordenada de Silício-Germânio". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.

50. PONTES, R.B. e SILVA, A.J.R. da - “Ab Initio Study of Phase Transitions in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Alloy Under Pressure”. In: *VIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, Juiz de Fora, MG*, de 14 a 18 de julho de 2002.
51. PONTES, R.B.; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - “Estudo Ab Initio da Liga $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ sob Pressão”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambu, MG*, de 07 a 11 de maio de 2002.
52. RISSI, E.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - “Propriedades Eletrônicas do Dímero Uréia-Água: Comparação Líquido, Gás e Aglomerado”. In: *VIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, Juiz de Fora, MG*, de 14 a 18 de julho de 2002.
53. RIVELINO, R.; CHAUDHURI P. e CANUTO S. - “Many-Body Interactions and Correlation Effects in H-Bonded Molecular Clusters”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambu, MG*, de 07 a 11 de maio de 2002.
54. RODRIGUES, S.C.P.; SIPAHI, G.M.; SCOLFARO, L.M.R. e LEITE, J.R. - “Electronic and Optical Properties of p-Doped Hexagonal Nitrides”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambu, MG*, de 07 a 11 de maio de 2002.
55. SCHOENMAKER, J.; NÓBREGA, L.N.; LANCAROTTE, M.S.; SANTOS, A.D. e SOUCHE, Y. - “Medidas magnéticas em escala (sub-) microscópica, através do SNOM-MO”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambu, MG*, de 07 a 11 de maio de 2002.
56. SCOPEL, W.L.; ORELLANA, W.; FAZZIO, A.; SILVA, A.J.R. da e FANTINI, M.C.A. - “Propriedades Químicas e Estruturais de Óxido e Oxi-Nitreto de Silício Amorfo Hidrogenado”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambu, MG*, de 07 a 11 de maio de 2002.
57. SCOPEL, W.L.; ORELLANA, W.; FAZZIO, A.; SILVA, A.J.R. da e FANTINI, M.C.A. - “Short-Range Order Structure of Oxygen-Rich a- SiO_xNy Films”. In: *VIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, Juiz de Fora, MG*, de 14 a 18 de julho de 2002.
58. SERGIO, C.S.; GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E. e LEITE, J.R. - “Large Skyrmions In A Two-Dimensional Systems With Tunable Landé G-Factor”. In: *1º Encontro de Nanodispositivos Semicondutores e Materiais Nanoestruturados - Rede NanoSemiMat, Recife, PE*, de 21 a 22 de março de 2002.
59. SERGIO, C.S.; GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; LEITE, J.R.; ESTIBALS, O. e PORTAL, J.C. - “Resonant Subband-Landau-Level Coupling in Parabolic Quantum Wells”. In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambu, MG*, de 07 a 11 de maio de 2002.

60. SILVA, C.R.S. da; JUSTO, J.F. e FAZZIO, A. - "Structural Order and Clustering in Annealed a-SiC and a-SiC:H and its Interface with Crystalline Si". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
61. SILVA, I.Z. da; SILVA, A.J.R. da; FAZZIO, A. e PIQUINI, P.C.- "Interaction Between Oxygen Molecules and Carbon Nanotubes". In: *VIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica*, Juiz de Fora, MG, de 14 a 18 de julho de 2002.
62. SILVA, I.Z. da; PIQUINI, P.C.; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - "Interaction Between Oxygen Molecules and Carbon Nanotubes". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
63. SIPAHI, G.M.; RODRIGUES, S.C.P.; NORIEGA, O.C.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; FREY, T. e LISCHKA, K. - "Interband Transitions in Cubic AlGa_N/Ga_N Quantum Wells". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
64. SOKOLOV, S.S.; FORTUNATO, W.; GALZERANI, J.C. e LEITE, J.R. - "Raman probing of spatial extended collective excitations". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
65. SOUZA, J.A.; GOYA, G.F. e JARDIM, R.F. - "Mössbauer Spectroscopy and Magnetoresistivity of ⁵⁷Fe substituted Mn in La_{0.7-x}Y_xCa_{0.3}MnO₃". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
66. TAKAHASHI, E.K. e FERAZ, A.C. - "Estudo da Reconstrução 4x2 Induzida por In na Superfície de GaSb(001)". In: *VIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica*, Juiz de Fora, MG, de 14 a 18 de julho de 2002.
67. TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; FURTHMÜLLER, J. e BECHSTEDT, F. - "Theoretical Studies of Thermodynamic, Electronic and Structural Properties of Zinc-Blende Al_{1-x}In_xN Alloys In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
68. TERRAZOS, L.A.; MARSZALEK, M.; SAITOVITCH, H.; SILVA, P.R.J.; PLAHA, P.; SCHWARZ, K. e PETRILLI, H.M.- "Gradiente de Campo Elétrico no Núcleo de uma Impureza Ta em Composto Intermetálicos com Zr e Hf por meio de Cálculos Ab Initio" In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.
69. VELASQUEZ, I.M.R.; GOYA, G.F.; VARANDA, L.C. e JAFELICCI Jr., M. - "Estudo das Propriedades Estruturais e Magnéticas de Partículas Ultrafinas Aciculares e α-Fe, obtidas por Redução a partir de Goetita". In: *XXV*

Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.

70. VENEZUELA, P.; DALPIAN, G.M.; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - "Vacancy-Mediated Diffusion in Disordered Alloys: Ge Self-Diffusion in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ". In: *XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambu, MG, de 07 a 11 de maio de 2002.*

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

1. AGUIAR O.D.; ANDRADE, L.A.; CAMARGO, L.; COSTA, C.A.; ARAUJO, J.C.N. de; NETO, E.C.D.; SOUZA S.T.; FAUTH, A.C.; FRAJUÇA, C.; FROSSATI, G.; FURTADO S.R.; FURTADO, V.G.S.; MAGALHÃES, N.S.; MARINHO, R.M.; MATOS, E.S.; MELIANI, M.T.; MELO, J.L.; MIRANDA, O.D.; OLIVEIRA Jr, N.F.; RIBEIRO, K.L.; SALLES, K.B.M.; STELLATI, C. and VELLOSO, W.F. - "The status of the Brazilian Spherical Detector", *Classical and Quantum Gravity* **19**, Iss 7, 1949-1953 (2002).
2. ALVES, H.W.L.; ALVES, J.L.A.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Planar Force-Constant Method for Lattice Dynamics of Cubic InN", *Materials Science and Engineering B - Solid State Materials for Advanced Technology* **93**, 90 (2002).
3. ALVES, H.W.L.; ALVES, J.L.A.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Planar Force-Constant Method for Lattice Dynamics of Cubic III-Nitrides", *Brazilian Journal of Physics* **32**, 448 (2002).
4. ANTONELLI, A.; JUSTO, J.F. and FAZZIO, A. - "Interaction of As Impurities with 30° Partial Dislocations in Si: An Ab Initio Investigation", *Journal of Applied Physics* **91**, 5892 (2002).
5. BERQUÓ, T.S.; IMBERNON, R.A.L.; BLOT, A. and PARTITI, C.S.M. - "Adsorption of Gold on Goethites from Burkina Faso, Africa: Magnetic Characterization". *Quaderni di Geofisica*, **26**, p.3-4, *Extended, International Symposium on Fundamental Rock Magnetism and Environmental Applications*, Erice, Itália (2002).
6. BRITO MOTA, F. de; JUSTO, J.F. and FAZZIO, A. - "Defect Centers in a-SiN_x: Electronic and Structural Properties", *Brazilian Journal of Physics* **32**, 436 (2002).
7. CANUTO, S.; COUTINHO, K. and TRZESNIAK, D. - "New Developments in Monte Carlo/Quantum Mechanics Methodology. The Solvatochromism of beta-Carotene in Different Solvents", *Advanced Quantum Chemistry* **41**, 161 (2002)

8. CARVALHO E SILVA, M.L.M.; PARTITI, C.S.M.; ENZWEILER, J.; PETIT, S.; NETTO, S.M. and OLIVEIRA, S.M.B. - "Characterization of Ni-containing Goethites by Mössbauer and other Techniques", *Hyperfine Interactions* **142** (3-4), 559-576 (2002).
9. CAVALHEIRO, A.; SILVA, E.C.F. da; TAKAHASHI, E.K.; QUIVY, A.A.; LEITE, J.R. and MENESES, E.A. - "Illumination as a Tool to Investigate the Quantum Mobility of the Two-Dimensional Electron Gas in a Si Delta-Doped GaAs/In(0.15)Ga(0.85) As/GaAs Quantum Well", *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* **65**, 75320 (2002).
10. CHAUDHURI, P. and CANUTO, S. - "An Ab Initio Study of the Peptide Bond Formation Between Alanine and Glycine. Electron Correlation Effects on the Structure and Binding Energy", *Journal of Molecular Structure (Theochem)* **577**, 267 (2002)
11. CHAUDHURI, P. and CANUTO, S. - "Correlation Effects on Peptide Molecules", *Indian Journal of Physics B* **76**, 577 (2002)
12. CHOQUE, N. M. S.; GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; BYKOV, A.A.; LITVIN, L.V.; MOSHEGOV, N.T.; TOROPOV, A.I.; MAUDE, D.K. and PORTAL, J. C. - "Chaotic Electron Dynamics in Antidot Lattice Subjected to Strong in-Plane Magnetic Field", *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* **66**, 35324 (2002).
13. CHOQUE, N.M.S.; GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; BYKOV, A.A.; BAKAROV, A.K. and TOROPOV, A.I. - "Geometrical Resonance in the Resistivity of Wide Quantum Wells", *Physica E* **13**, 777 (2002).
14. DALPIAN, G.M.; VENEZUELA, P.; SILVA, A.J.R. da. and FAZZIO, A. - "Ab Initio Calculations of Vacancies in $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ ", *Applied Physics Letters* **81**, 3383 (2002).
15. ESCOTE, M.T.; MEZA, V.A.; JARDIM R.F.; BEN-DOR, L.; TORIKACHVILI, M.S. and LACERDA, A.H. - "Upper Critical Field of the Magnetic Superconductor $\text{RuGd}_{1.4}\text{Ce}_{0.6}\text{Sr}_2\text{Cu}_2\text{O}_{10}$ ", *Physical Review B - Solid State* **66**, 14450 (2002).
16. FERRAZ, A.C. and MIOTTO, R. - "Zn-Induced Features at the GaAs(110) Surface: A First-Principles Study", *Vacuum* **67**, 31 (2002)
17. FONSECA, F.C.; GOYA, G.F.; JARDIM, R.F.; MUCCILLO, R.; CARREÑO, N.L.V.; LONGO, E. and LEITE, E.R. - "Superparamagnetism and Magnetic Properties of Amorphous SiO_2 -coated Ni Nanoparticles", *Physical Review B* **66**, 104406/1-104406/5 (2002).
18. FROTA-PESSÔA, S.; KLAUTAU, A.B. and LEGOAS, S.B. - "Influence of Interface Mixing on the Magnetic Properties of Ni/Pt Multilayers", *Physical Review* **66**, 132416 (2002).

19. GOYA, G.F. - “Magnetic and Transport Properties of Mechanosynthesized FeCr_2S_4 Sulfospinel”, *Materials Science Forum*, **386-389**, 491-496 (2002).
20. GOYA, G.F. and RECHENBERG, H.R. - “On the Magnetic Properties of Mechanosynthesized and Ball-Milled Spinel Ferrites”, *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials* **14**, 127-132 (2002).
21. GOYA, G.F.; MEMO, A. and HAEUSELER, H. - “Magnetic and Mössbauer Study of the Novel $\text{Fe}_{1n2}\text{S}_2\text{Se}_2$ Layered Compound”, *Journal of Solid State Chemistry* **164**, 2, 326-331 (2002).
22. GOYA, G.F.; RECHENBERG, H.R. and IBARRA, M.R. - “Spin Dynamics of Nanostructured $\text{La}_{1/3}\text{Ca}_{2/3}\text{MnO}_3$ ”, *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials* **13**, 433-438 (2002).
23. GOYA, G.F.; SOUZA, J.A. and JARDIM, R.F. - “Mössbauer Spectroscopy and Magnetoresistivity of ^{57}Fe Substituted Mn in $\text{La}_{0.7-x}\text{Y}_x\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ Manganites”, *Journal of Applied Physics* **91**, 7932 (2002).
24. GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; BAKAROV, A.K.; TOROPOV, A.I.; ESTIBALS, O. and PORTAL, J.C. - “Magnetotransport of a Quasi-Three-Dimensional Electron Gas in the Lowest Landau Level”, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* **65**, 205316 (2002).
25. HENRIQUES, A.B.; HANAMOTO, L.K.; TRIBUZY, C.V.B., SOUZA, P.L. and YAVICH, B. - “Interfacial Layers and Impurity Segregation in InP/InGaAs Superlattices”, *Brazilian Journal of Physics* **32**, 334 (2002).
26. HENRIQUES, A.B.; TRIBUZY, C.V.B.; LANDI, S.M.; PAMPLONA-PIRES, M.; BUTENDEICH, R.; SOUZA, P.L.; BITTENCOURT, A.C. and MARQUES, G.E. - “Nipi Delta-Doping Superlattices for Amplitude Modulation”, *Brazilian Journal of Physics* **32**, 269 (2002).
27. HUSBERG, O.; KHARTCHENKO, A.; VOGELSANG, H.; AS, D.J.; LISCHKA, K.; NORIEGA, O.C.; TABATA, A.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - “Photoluminescence Associated with Quantum Dots in Cubic GaN/InGaN/GaN Double Heterostructures”, *Physica E* **13**, 1090 (2002).
28. JONEN, S.; RECHENBERG, H.R. and CAMPO, J. - “Rare Earth Effects on the Magnetic Behavior of $\text{R}_6\text{Fe}_{11-x}\text{Al}_{3+x}$ Compounds”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **242-245**, 803-805 (2002).
29. JUSTO, J.F.; ANTONELLI, A. and FAZZIO, A. - “Arsenic Segregation, Pairing and Mobility on the Partial Dislocation in Silicon”, *Journal of Physics B* **14**, 12761 (2002).
30. JUSTO, J.F.; BRITO MOTA, F. de and FAZZIO, A. - “First-Principles Investigation of a-SiN_x:H”, *Physical Review B* **65**, 073202 (2002).

31. JUSTO, J.F.; NUNES, R.W. and ASSALI, L.V.C. - "Microscopic Structure of the 90° and 30° Partial Dislocations in Gallium Arsenide", *Journal of Physics Condensed Matter* **14**, 12749 (2002).
32. KIRSCH, R.; PRANDOLINI, M.J.; BEUTLER, O.; BREWER, W.D.; KAPOOR, J.; GRUYTERS, M.; RIEGEL, D.; EBERT, H. and FROTA-PESSÔA, S. - "The Formation of Orbital Moments on Iron Impurities in Ag_{1-x}Au_x Alloys", *Europhysics Letters* **59**, 430 (2002).
33. KLAUTAU, A.B. and FROTA-PESSÔA, S. - "Magnetism of Co Clusters Embedded in Cu(001) Surfaces: An AB Initio Study", *Surface Science* **497**, 385 (2002).
34. KÖHLER, U.; AS, D.J.; POTTHAST, S.; KHARCHENKO, A.; LISCHKA, K.; NORIEGA, O.C.; MENESES, E.A.; TABATA, A.; RODRIGUES, S.C.P.; SCOLFARO, L.M.R.; SIPAHI, G.M. and LEITE, J.R. - "Optical Characterization of Cubic AlGaIn/GaN Quantum Wells", *Physica Status Solidi A - Applied Research* **192**, 129 (2002).
35. LAURETO, E.; MENESES, E.A.; CARVALHO JR, W.; BERNUSI, A.A.; RIBEIRO, E.; SILVA, E.C.F. da and OLIVEIRA, J.B.B. - "Optical Studies of the Correlation Between Interface Disorder and the Photoluminescence Line Shape in GaAs/InGaP Quantum Wells", *Brazilian Journal of Physics* **32**, 314 (2002).
36. LEITE, J.R. - "Origin of the Radiative Emission in Blue-Green Light Emitting Diodes and Laser Diodes Based on GaN/InGaN Heterostructures", *Microelectronics Journal* **33**, 323 (2002).
37. MALASPINA, T.; COUTINHO, K. and CANUTO, S. - "Ab initio Calculation of Hydrogen Bonds in Liquids. A Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Study of Pyridine in Water", *Journal of Chemical Physics* **117**, 1692 (2002).
38. MARQUES, R.F.C.; JAFELICCI Jr., M.; PAIVA SANTOS, C.O.; JARDIM, R.F.; SOUZA, J.A.; VARANDA, L.C. and GODOY, R.H.M. - "Nanoparticles of La_{1-x}Sr_xMnO₃ Compounds", *IEEE Transactions on Magnetism* **38**, 2892 (2002).
39. MARTINI, S.; QUIVY, A.A.; SILVA, E.C.F. da and LEITE, J.R. - "Real-Time Determination of the Segregation Strength of Indium Atoms InGaAs Layers Grown by Molecular Beam Epitaxy", *Applied Physics Letters* **81**, 2863 (2002).
40. MATHUR, S.; SHEN, H.; LECERF, N.; KJEKSHUS, A.; FJELLVAG, H. and GOYA, G.F. - "Nanocrystalline Orthoferrite GeFeO₃ from a Novel Heterobimetallic Precursor", *Advanced Materials* **14**, 19, 1405-1409 (2002).
41. MEZA, V.A.; GRATENS, X. and JARDIM, R.F. and BEN-DOR, L. - "Preparation and General Physical Properties of Polycrystalline PrBa₂Cu₃O_{7-x}

- obtained from Sol-Gel Precursors”, *Brazilian Journal of Physics* **32**, 731 (2002).
42. MIOLA, E.J.; SOUZA, S.D. de; OLZON-DIONYSIO, M.; SPINELLI, D. and RECHENBERG, H.R. - “Plasma Nitriding of Pure Iron at Several Temperatures”, *Physica Status Solidi (b)* **231**, 385-390 (2002).
 43. MIOTTO, R. and FERRAZ, A.C. - “A Theoretical Study of C₂H₂ Adsorption on the Ge(001) Surface”, *Surface Science* **513**, 422 (2002).
 44. MIOTTO, R. and FERRAZ, A.C. - “Zn-Induced Features at the GaAs(110) Surface and its Importance in the Growth of ZnSe on GaAs(110)”, *Applied Physics Letters* **81**, 481 (2002).
 45. MIOTTO, R.; FERRAZ, A.C. and SRIVASTAVA, G.P. - “Acetylene Adsorption on the Si(001) Surface”, *Physical Review B* **65**, 075401 (2002).
 46. MIOTTO, R.; FERRAZ, A.C. and SRIVASTAVA, G.P. - “First-Principles Study of the Adsorption of PH₃ on Ge(001) and Si(001) Surfaces”, *Brazilian Journal of Physics* **32**, 392 (2002).
 47. MIOTTO, R.; FERRAZ, A.C. and SRIVASTAVA, G.P. - “Comparative Study of the Adsorption of C₂H₄ on the Si(001) and Ge(001) Surfaces”, *Surface Science* **507-510**, 12 (2002).
 48. NOGUEIRA, R.N. and PETRILLI, H.M. - “Hyperfine Fields at Co Clusters in Bulk Ag and Cu by a First-Principles Study: The Role of the Nearest Neighbourhood”, *Journal of Physics: Condensed Matter* **14**, 1067 (2002).
 49. NORIEGA, O.C.; LEITE, J.R.; MENESES, E.A.; SOARES, J.A.N.T.; RODRIGUES, S.C.P.; SCOLFARO, L.M.R.; SIPAHI, G. M.; KÖHLER, U.; AS, D.J.; POTTHAST, S.; KHARCHENKO, A. and LISCHKA, K. - “Photoluminescence and Photoreflectance Characterization of Cubic GaN/Al_xGa_{1-x}N Quantum Wells”, *Physica Status Solidi C* **0**, 528 (2002).
 50. ORELLANA, W. and FERRAZ, A.C. - “Stability and Electronic Structure of Hydrogen-Nitrogen Complexes in GaAs”, *Applied Physics Letters*. **81**, 3816 (2002).
 51. ORELLANA, W.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - “Influence of Spin State on Dynamical Processes of O₂ in α -Quartz”, *Material Research Society*, p. 32 (2002).
 52. ORMEÑO, P.G.G.; SCHÖN, C.G. and PETRILLI, H.M. - “Ab Initio Calculations of the Formation Energies of BCC-Based Superlattices in the Fe-Al System”, *Calphad-Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry* **26**, 573-582 (2002)
 53. PADUAN FILHO, A. and BECERRA, C.C. - “Magnetic Properties and Critical Behavior of Pure and Diluted 2-D Weak Ferromagnet”, *Journal of Applied Physics* **91**, 8249-8250 (2002).

54. PAIVA, R.; ALVES, J. L. A.; NOGUEIRA, R.A.; OLIVEIRA, C.; ALVES, H.W.L.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Theoretical Study of the $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ Alloys", *Materials Science and Engineering B - Solid State Materials for Advanced Technology* **93**, 2 (2002).
55. PAIVA, R.; NOGUEIRA, R.A.; OLIVEIRA, C.; ALVES, H.W.L.; ALVES, J.L.A.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "First-Principles Calculations of the Effective Mass Parameters of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ and $\text{Zn}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ Alloys", *Brazilian Journal of Physics* **32**, 405 (2002).
56. PARTITI, C.S.M.; IMBERNON, R.A.L.; FRANCO, D.R.; BERQUÓ, T.S. and BEVILACQUA, J.E. - "Magnetic Characterization of Sediments of Urban Supply Lakes in São Paulo, Brazil, *Hyperfine Interactions (c)* **5**, 453-456 (2002).
57. PENDL JR., W.; COAQUIRA, J.A.H.; RECHENBERG, H.R. and SKOLOZDRA, R.V. - "Mössbauer Investigation of RCO_3Sn Compounds (R = Gd-Tm)", *Journal of Alloys and Compounds* **346**, 62-67 (2002).
58. PUSEP, Y.A.; SILVA, M.T.O.; FERNANDEZ, J.R.L.; CHITTA, V.A.; LEITE, J.R.; FREY, T.; AS, D.J.; SCHIKORA, D. and LISCHKA, K. - "Raman Study of Collective Plasmon-L Phonon Excitations in Cubic GaN and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ Epitaxial Layers", *Journal of Applied Physics* **91**, 6197 (2002).
59. QUINTÃO, A.D.; COUTINHO, K. and CANUTO, S. - "Theoretical Study of the Hydrogen Bond Interaction Between Methylene Blue and Water and Possible Role on Energy Transfer for Photodynamics", *International Journal of Quantum Chemistry* **90**, 634 (2002).
60. RAMOS, L.E.; FURTHMÜLLER, J.; BECHSTEDT, F.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R.- "Ab Initio Theory of Native Defects in Alloys: Application to Charged N Vacancies in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ", *Journal of Physics Condensed Matter* **14**, 2577 (2002).
61. RAMOS, L.E.; FURTHMÜLLER, J.; LEITE, J.R.; SCOLFARO, L.M.R. and BECHSTEDT, F. - "Carbon-Based Defects in GaN: Doping Behaviour". *Physica Status Solidi B-Basic Research* **234**, 864 (2002).
62. RAMOS, L.E.; FURTHMÜLLER, J.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. and BECHSTEDT, F. - "Substitutional Carbon in III-Nitrides: Ab Initio Description of Shallow and Deep Levels", *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* **66**, 75209 (2002).
63. REIS, S.T.; FARIA, D.L.A.; MARTINELLI, J.R.; PONTUSCHKA, W.M.; DAY, D.E. and PARTITI, C.S.M. - "Structural Features of Lead Iron Phosphate Glasses", *Journal of Non-Crystalline Solids* **304**, 188-194 (2002).
64. RIVELINO, R.; COUTINHO, K. and CANUTO, S. - "A Monte Carlo-Quantum Mechanics Study of the Solvent-Induced Spectral Shift and the

- Specific Role of Hydrogen Bonds in the Conformational Equilibrium of Furfural in Water”, *Journal of Physical Chemistry B* **106**, 12317 (2002).
65. RIVELINO, R; LUDWIG, V.; RISSI, E. and CANUTO, S. - “Theoretical Studies of Hydrogen Bonding in Water-Cyanides and in the Base Pair Gu-Cy”, *Journal of Molecular Structure* **615**, 259 (2002).
66. ROCHA, W.R.; MARTINS, V.M.; COUTINHO, K. and CANUTO, S. - “Solvent Effects on the Electronic Absorption Spectrum of Formamide Studied by a Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Approach”, *Theoretical Chemistry Accounts* **108**, 31 (2002).
67. RODRIGUES, S.C.P.; SCOLFARO, L.M.R.; SIPAHI, G.M.; NORIEGA, O.C.; and LEITE, J.R. - “k.p. Calculations of Electronic and Optical Properties in P Doped (001) AlGa_N/Ga_N Thin Superlattices”, *Physica Status Solidi B - Basic Research* **234**, 906 (2002).
68. RODRIGUES, S.C.P.; SIPAHI, G.M.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - “Hole Charge Localization and Band Structures of P-Doped Ga_N/InGa_N and GaAs/InGaAs Semiconductor Heterostructures”, *Journal of Physics Condensed Matter* **14**, 5813 (2002).
69. RODRIGUES, S.C.P.; SIPAHI, G.M.; SCOLFARO, L.M.R.; NORIEGA, O.C.; LEITE, J.R.; FREY, T.; AS, D.J.; SCHIKORA, D. and LISCHKA, K. - “Inter and Intraband Transitions in Cubic Nitride Quantum Wells”, *Physica Status Solidi A - Applied Research* **190**, 121 (2002).
70. SAGREDO, V.; TER HAAR, E. and ATTOLINI, G. - “Magnetic Properties of MnGa₂Se₄MnIn₂Se₄ Single Crystal Semiconductors”, *Physica B* **320**, 407-409 (2002).
71. SALES, F.V.; SILVA, S.W. da; MONTE, A.F.G.; SOLER, M.A.G.; CRUZ, J.M.R.; SILVA, M.J. da; QUIVY, A.A.; MORAIS, P.C. and LEITE, J.R. - “Investigation of Optical and Structural Properties of In_xGa_{1-x}As/GaAs Quantum Wells Grown on Vicinal GaAs(001) Substrates”, *Journal of Physics Condensed Matter* **311**, 285 (2002).
72. SANTOS, A.M.; SILVA, E.C.F. da; NORIEGA, O.C.; ALVES, H.W.L.; ALVES, J.L.A. and LEITE, J.R. - “Vibrational Properties of the Cubic Al_xGa_{1-x}N and In_xGa_{1-x}N Ternary Alloys”, *Physica Status Solidi B - Basic Research* **232**, 182 (2002).
73. SCOLFARO, L.M.R. - “Phase Separation in Cubic Group-III Nitride Alloys”, *Physica Status Solidi (a)* **190**, 15 (2002).
74. SCOLFARO, L.M.R.; MARQUES, M.; TELES, L.K.; ANJOS, V; FREIRE, V.N., FARIAS, G.A.; SILVA Jr., E.F. da and LEITE, J.R. - “Ab Initio Calculations of Electronic and Dielectric Properties of Cubic SrTiO₃”, *Proceedings of the 26th International Conference on the Physics of Semiconductors*, CD-ROM, Edinburgh, UK (2002).

75. SERGIO, C.S.; GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; OLSHANETSKII, E.B.; BYKOV, A.A.; MOSHEGOV, N.T.; BAKAROV, A.; TOROPOV, A.I.; MAUDE, D.K.; ESTIBALS, O. and PORTAL, J.C. - "Landau Levels in Two and Three-Dimensional O Electron Gases in a Wide Parabolic Quantum Well", *Brazilian Journal of Physics* **32**, 347 (2002).
76. SERRANO, A. and CANUTO, S. - "Solvent Effects in the First Dipole Hyperpolarizability of Phenol Blue. A Bond-Length Alternation Analysis", *International Journal of Quantum Chemistry* **87**, 275 (2002).
77. SHAPIRA, Y. and BINDILATTI, V. - "Magnetization Steps Studies of Antiferromagnetic Clusters and Single Ions: Exchange, Anisotropy and Statistics", *Journal of Applied Physics* **92** n. 8, 4155-4185 (2002).
78. SILVA, C.R.S. da; JUSTO, J.F. and FAZZIO, A. - "Structural Order and Clustering in Annealed α -SiC and α -SiC:H Films", *Material Research Society*, 30 (2002).
79. SILVA, C.R.S. da; JUSTO, J.F. and FAZZIO, A. - "Structural Order and Clustering in Annealed α -SiC and α -SiC:H", *Physical Review B* **65**, 104108 (2002).
80. SILVA, M.J. da; QUIVY, A.A.; GONZALEZ BORRERO, P.P.; MAREGA JR., E. and LEITE, J.R. - "Atomic-Force-Microscopy Study of Self-Assembled InAs Quantum Dots along their Complete Evolution Cycle", *Journal of Crystal Growth* **241**, 19 (2002).
81. SOUZA, L.E.S. de and CANUTO, S. - "The Equation of State of Hard-Spherocylinder Fluid Mixtures", *Physical Chemistry and Chemical Physics* **4**, 922 (2002).
82. TABATA, A.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; KHARCHENKO, A.; FREY, T.; AS, D.J.; SCHIKORA, D.; LISCHKA, K.; FURTHMÜLLER, J. and BECHSTEDT, F. - "Phase Separation Suppression in InGaN Alloys due to Biaxial Strain", *Applied Physics Letters* **80**, 769 (2002).
83. TELES, L.K.; FURTHMÜLLER, J.; SCOLFARO, L.M.R.; TABATA, A.; LEITE, J.R.; BECHSTEDT, F.; FREY, T.; AS, D.J. and LISCHKA, K. - "Phase Separation and Gap Bowing in Zinc-Blende InGaN, InAlN, B GaN, and BAlN Alloy Layers", *Physica E* **13**, 1086 (2002).
84. TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; FURTHMÜLLER, J.; BECHSTEDT, F.; LEITE, J.R. - "Phase Separation, Gap Bowing, and Structural Properties of Cubic $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ ", *Physica Status Solidi B - Basic Research* **234**, 956 (2002).
85. TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; FURTHMÜLLER, J. and BECHSTEDT, F. - "Phase Diagram, Chemical Bonds, and Gap Bowing of Cubic $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ Alloys: Ab Initio Calculations", *Journal of Applied Physics* **92**, 7109 (2002).

86. TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; FURTHMÜLLER, J. and BECHSTEDT, F. - "Spinodal Decomposition in $B_xGa_{1-x}N$ and $B_xAl_{1-x}N$ alloys", *Applied Physics Letters* **80**, 1177 (2002).
87. TERRAZOS, L.A.; PETRILLI, H.M.; MARSZALEK, M.; SAITOVITCH, H.; SILVA, P.R.J.; BLAHA, P. and SCHWARZ, K. - "Electric Field Gradients at Ta in Zr and Hf Intermetallic Compounds". *Solid State Comm.* **121**, 525 (2002).
88. TRZESNIAK, D.; CAIRES, A.C.F.; ALMEIDA, P.C. and CANUTO, S. - "Theoretical and Experimental Study of the Spectroscopic Properties of the E-64 Protease Inhibitor", *Journal of Molecular Structure (Theochem)* **585**, 129 (2002).
89. VENEZUELA, P.; DALPIAN, G.M.; SILVA, A.J.R.da and FAZZIO, A. - "Vacancy-Mediated Diffusion in Disordered Alloys: Ge Self-Diffusion in $Si_{1-x}Ge_x$ ", *Physical Review B* **65**, 193306 (2002).
90. VIVAS, P.G.; SILVA, E.E.; CARVALHO, L.C. de; ALVES, J.L.A.; ALVES, H.W.L.; SCOLFARO, L.M.R. and LEITE, J.R. - "Adsorption of Si and C Atoms over SiC(111) Surfaces, *Brazilian Journal of Physics* **32**, 396 (2002).
91. WINNISCHOFER, H.; ENGELMANN, F.M.; TOMA, H.E.; ARAKI, K. and RECHENBERG, H.R. - "Acid-Base and Spectroscopic Properties of a Novel Supramolecular Porphyrin Bonded to Four Pentacyanoferrate(II) Groups", *Inorganica Chimica Acta* **338**, 27-35 (2002).
92. ZHAO, S.; JUSTO, J.F.; ASSALI, L.V.C. and KIMERLING, L.C. - "Structure and Bonding of Iron-Acceptor Pairs in Silicon", *Brazilian Journal of Physics* **32**, 418-420 (2002).

5d - Trabalhos Aceitos para Publicação:

1. ASSALY, L.V.C.; GAN, F.; KIMERLING, L.C. and JUSTO, J.F. - "Electronic Structure of Light Emitting Centers in Er Doped Si", *Applied Physics A*.
2. BECHSTEDT, F.; FURTHMÜLLER, J.; FERHAT, M.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; DAVYDOV, Y.; AMBACHER, O. and GOLDHAHN, R. - "Energy Gap and Optical Properties of $In_xGa_{1-x}N$ ", *Physica Status Solidi A*.
3. CHOQUE, N.M.S.; GUSEV, G.M.; LEITE, J.R.; BYKOV, A.A.; LITVIN, L.V.; MOSHEGOV, N.T.; TOROPOV, A.I.; ESTIBALS, O. and PORTAL, J.C. - "Commensurability Oscillations in Antidot Lattice in Quasi-Three Dimensional Electron Gas", *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*.
4. CRUZ, J.M.R.; SALES, F.V.; SILVA da, S.W.; SOLER, M.A.G.; MORAIS, P.C.; SILVA, M.J.; QUIVY, A.A. and LEITE, J.R. - "CW Photoluminescence

- Determination of the Capture Cross-Section of Self-Assembled InAs Quantum Dots”, *Physica E*.
5. FAGAN, S.B.; MOTA, R.; BAIERLE, R.J.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - “Ab Initio Study of an Organic Molecule Interacting with a Silicon-Doped Carbon Nanotube”, *Diamond & Related Materials*.
 6. FAGAN, S.B.; MOTA, R.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - “Ab Initio Study of an Iron Atom Interacting with Single-Wall Carbon Nanotubes”, *Physical Review B*.
 7. FAGAN, S.B.; MOTA, R.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - “Electronic and Magnetic Properties of Iron Chains on Carbon Nanotubes”, *Microelectronics Journal*.
 8. FAGAN, S.B.; SILVA, A.J.R. da; MOTA, R.; BAIERLE, R.J. and FAZZIO, A. - “Functionalization of Carbon Nanotubes Through the Chemical Binding of Atoms and Molecules”, *Physical Review B*.
 9. FONSECA, F.C.; GOYA, G.F.; JARDIM, R.F.; CARREÑO, N. L.; LONGO, E.; LEITE, E.R. and MUCCILLO, R. - “Magnetic Properties of Ni:SiO₂ Nanocomposites Synthesized by a Modified Sol-Gel Method”, *Applied Physics A Materials Science*.
 10. HANAMOTO, L.K.; FARIAS, C.M.A.; HENRIQUES, A.B.; TRIBUZY, C.V.B.; SOUZA, P.L. and YAVICH, B. - “Influence of the Interface Layers on the Transport Properties of In P / In GaAs Quantum Barrier Structures”, *Journal of Applied Physics*.
 11. HUSBERG, O.; KHARCHENKO, A.; AS, D.J.; LISCHKA, K.; SILVEIRA, E.; NORIEGA, O.C.; FERNANDEZ, J.R.L. and LEITE, J.R. - “Thermal annealing of cubic - InGaN/GaN Double Heterostructures”, *Physica Status Solidi C*.
 12. MIOTTO, R.; KISS, F.D. and FERRAZ, A.C. - “Oxygen Adsorption on CdTe(110)”, *Surface Science*.
 13. MIWA, R.H.; MIOTTO, R. and FERRAZ, A.C. - “Ab Initio Study of the GaAs(001)-In (4x2) Surface”, *Physical Review B*.
 14. MIWA, R.H.; VENEZUELA, P. and FAZZIO, A. - “Theoretical Investigation of Extended Defects and Their Interactions with Vacancies in Si_xGe_{1-x}”, *Physical Review B*.
 15. MONTE, F.G.; SALES, F.V.; SILVA da, S.W.; CRUZ, J.M.R.; SOLER, M.A.G.; MORAIS, P.C.; SILVA, M.J.; QUIVY, A.A. and LEITE, J.R. - “Photoexcited Carrier Diffusion in Self-Assembled InAs/GaAs Quantum Dots with Different Dot Densities”, *Physica E*.

16. NOVAES, F.D.; SILVA, A.J.R. da; SILVA, E.Z. da and FAZZIO, A. - “Effect of Impurities in the Large Au-Au Distances in Gold Nanowires”, *Physical Review Letters*.
17. ORELLANA, W.; SILVA, A.J.R. da. and FAZZIO, A. - “Oxidation at the Si/SiO₂ Interface: Influence of the Spin Degree of Freedom”, *Physical Review Letters*.
18. RISSI, E.; RIVELINO, R. and CANUTO, S. - “Application of Density Functional Theory Methods in Millimeter Wave Spectroscopy”, *International Journal of Quantum Chemistry*.
19. SALES, F.V.; SILVA, S.W. da; CRUZ, J.M.R.; SOLER, M.A.G.; MORAIS, P.C.; SILVA, M.J.; QUIVY, A.A. and LEITE, J.R. - “Observation of the Spectral Dependence of the Spatial Photocarrier Redistribution in InAs/GaAs Quantum Dots”, *Physica E*.
20. SCHMIDT, T.M.; BAIERLE, R.J.; PIQUINI, P. and FAZZIO, A. - “Theoretical Study of Native Defects in BN Nanotubes”, *Physical Review B*.
21. TABATA, A.; OLIVEIRA, J.B.B.; LAMAS, T.E.; SERGIO, C.S.; QUIVY, A.A.; GUSEV, G.M. and LEITE, J.R. - “Optical Properties of Remotely Doped Parabolic Quantum Wells”, *Physica E*.
22. 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”, *Microelectronic Journal*.

5e - Trabalhos Submetidos à Publicação:

1. ANJOS, V.; SOUZA, M.A.R.; LEITE, J.R. and SCHÜLLER, C. - “About Single-Particle Excitations in Resonant Raman Scattering in Modulation-Doped Quantum Wells”, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*.
2. ARAUJO, C.M.; FERNANDEZ, J.R.L.; SILVA, A.F. da; PEPE, I.; LEITE, J.R., SERNELIUS, B.E.; TABATA, A.; PERSSON, C.; AHUJA, R.; AS, D.J.; SCHIKORA, D. and LISCHKA, K. - “Electrical Resistivity, MNM Transition and Band-Gap Narrowing of Cubic GaN:Si”, *Microelectronics Journal*.
3. COUTINHO, K.; GUEDES, R.C.; COSTA CABRAL, B.J. and CANUTO, S. - “Electronic Polarization of Liquid Water: Converged Monte Carlo-Quantum Mechanics Results for the Multipole Moments”, *Chemical Physics Letters*.
4. COPPOLA, H.R.; SANCHEZ, J.T.; LEITE, J.R.; SCOLFARO, L.M.R. and MOLINER, F.G. - “The Absorption Coefficient of Low Dimensional Semiconductor Systems: The Photoluminescence of InGaN Quantum Dot”,

Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics.

5. DUARTE, C.A.; SILVA, E.C.F. da, QUIVY, A.A.; SILVA, M.J.; MARTINI, S.; LEITE, J.R., MENESES, E.A. and LAURETO, E. - "Influence of the Temperature on the Carrier Capture into Self-Assembled InAs/GaAs Quantum Dots", *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*.
6. FILETI, E.E.; RIVELINO, R. and CANUTO, S. - "Rayleigh Light Scattering of Hydrogen Bonded Clusters", *Journal of Physics B, Atom. Mol. Opt.*.
7. GUSEV, G.M., QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; LEITE, J.R.; ESTIBALS, O. and PORTAL, J.C. - "Quantum Hall Ferromagnets in Parabolic Wells", *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*.
8. GUSEV, G.M.; BARAKOV, A.K.; TOROPOV, A.I.; ESTIBALS, O.; PORTAL, J.C. and LEITE, J.R. - "New Correlated State in a Quasi-Three Dimensional Electron Gas near Landau Filling Factor $1/3$ ", *European Physical Journal A*.
9. LAMAS, T.E.; MARTINI, S.; SILVA, M.J.; QUIVY, A.A. and LEITE, J.R. - "Morphological and Optical Properties of P-type GaAs(001) Layers Doped with Silicon", *Brazilian Journal of Physics*.
10. MARQUES, M.; TELES, L.K.; ANJOS, V.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R., FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A. and SILVA Jr, E.F. - "Full-Relativistic Calculations of the SrTiO₃ Carrier Effective Masses and Complex Dielectric Function", *Applied Physics Letters*.
11. MARQUES, M.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R.; FURTHMÜLLER, J. and BECHSTEDT, F. - "Lattice Parameter and Energy Band Gap of Cubic Al_xGa_y In_{1-x-y} N Quaternary Alloys", *Applied Physics Letters*.
12. MARTINI, S.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E.; SILVA, M.J.; SILVA, E.C.F. da and LEITE, J.R. - "In Situ Investigation of Indium Segregation in InGaAs Layers Grown on Vicinal GaAs (001) Substrates", *Applied Physics Letters*.
13. ORELLANA, W.; MIWA, R.H. and FAZZIO, A. - "First-Principles Calculations of Carbon Nanotubes Adsorbed on Si(001)", *Physical Review Letters*.
14. QU, F.; LINO, A.T.; DANTAS, N.O.; SILVA da, E.C.F.; QUIVY, A.A. and LEITE, J.R. - "Optical Properties of H-Band Emission in Single Heterojunctions", *Journal of Applied Physics*.
15. RAMOS, L.E.; FURTHMÜLLER, J.; LEITE, J.R. and SCOLFARO, L.M.R. - "Group-IV and Group-V Substitutional Impurities in Cubic Group-III Nitrides", *Physical Review B*.
16. RODRIGUES, C.G.; FERNANDES, J.R.L.; FREIRE, V.N.; VASCONCELOS,

- A.R.; LEITE, J.R., CHITTA, V.A. and LUZZI, R. - “Hole Mobility in Zincblende GaN”, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*.
17. SALES, F.V.; CRUZ, J.M.R.; SILVA da, S.W.; SOLER, M.A.G.; MORAIS, P.C.; SILVA, M.J.; QUIVY, A.A. and LEITE, J.R. - “Unveiling Carrier Kinetics in Quantum Dots (QD) Through CW Photoluminescence Modeling: A Systematic Study on a QD Surface Density Gradient Sample”, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*.
18. SILVA, M.J.; MARTINI, S.; LAMAS, T.E.; QUIVY, A.A.; SILVA, E.C.F. da, LEITE, J.R. - “Low Growth Rate InAs/GaAs Quantum Dots for Room-Temperature Luminescence Over 1.3mm”, *Brazilian Journal of Physics*.
19. TELES, L.K.; FERREIRA, L.G.; LEITE, J.R.; SCOLFARO, L.M.R., KHARCHENKO, A.; HUSBERG, O.; AS, D.J.; SCHIKORA, D. and K. LISCHKA, - “Strain Induced Ordering in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alloys”, *Applied Physics Letters*.
20. 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*.

5f - Capítulo de Livro:

1. CANUTO, S. - “Van der Waals Interaction Probed by Solvatochromic Shifts”. Capítulo do livro *Current Developments in Atomic, Molecular and Chemical Physics with Applications*, organizado por M. Manmohan, Editora Kluwer Plenum, 127-131 (2002).

5g - Livros:

1. TUTOR-SANCHEZ, J.; HERNANDEZ-CALDERON, I. and LEITE, J.R. (editors)- “Semiconductor Nanostructures: Micro and Optoelectronics Applications”, *Microelectronics Journal* **33** (2002).
2. UETA, A.Y.; TUTOR-SANCHEZ, J. and LEITE, J.R. (editors) - “Proceedings of the 2nd Ibero American Workshop on Nanostructures for Applications in Micro and Optoelectronics (NANO' 2001)”, São José dos Campos, SP, 26-30 November 2001. *Physica Status Solidi (b)* **32**, 1 (2002).