Departamento de Física dos Materiais e Mecânica

RELATÓRIO DE ATIVIDADES

2006

Editor

Prof. Dr. Renato de Figueiredo Jardim
Chefe do DFMT

Editoração

Rosana Batista Gimenes Biz
Secretaria do DFMT

Fonte de Dados

Cecília Aparecida Cavalheiro Maia

Secretaria 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

Secretaria do Laboratório de Materiais Magnéticos - LMM

Tatiana Lacerda Costa

Secretaria do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores - LNMS-MBE

Marisa Fernandes da Silva
Sandra Regina Rodrigues Ribeiro

Secretaria do Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Impressão

Gráfica do IFUSP (setembro de 2007)

SUMÁRIO

1 COMPOSIÇÃO DO DEPARTAMENTO
1.1 Chefia .....
1.2 Conselho Departamental.....
1.3 Corpo Docente .....
1.4 Pessoal Técnico e Administrativo.....
2 ATIVIDADES DE ENSINO E FORMAÇÃO CIENTÍFICA
2.1 Disciplinas de Graduação Ministradas no 1º Semestre de 2006.....
2.2 Disciplinas de Graduação Ministradas no 2º Semestre de 2006.....
2.3 Disciplinas de Pós-Graduação Ministradas no 1º Semestre de 2006 ....
2.4 Disciplinas de Pós-Graduação Ministradas no 2º Semestre de 2006 ....
2.5 Seminários .....
2.6 Participação de Docentes em Comissões Organizadoras de Eventos...
2.7 Projetos de Pós-Doutorado .....
Concluídos e em Andamento .....
2.8 Doutorados.....
Concluídos .....
Em Andamento .....
2.9 Mestrados .....
Concluídos .....
Em Andamento .....
2.10 Projetos de Iniciação Científica.....
3 ATIVIDADES DE EXTENSÃO E GESTÃO ACADÊMICA
3.1 Atividades Administrativas Institucionais.....
3.2 Assessorias e Consultorias (inclusive arbitragens para revistas).....
3.3 Cursos, Palestras, Mesas-Redondas, “Invited Talks” e Outros.....
3.4 Participação de Docentes em Concursos no IFUSP como Candidatos .
3.5 Participação em Comissões Julgadoras no IFUSP .....
3.6 Participação em Comissões Julgadoras em outras Instituições.....
3.7 Participação em Conselhos, Comissões e Grupos de Trabalho de .....
Entidades Oficiais ou Privadas
4 ATIVIDADES DE PESQUISA
4.1 Grupos de Pesquisa .....
4.2 Trabalhos em Andamento ou Concluídos em 2006 .....
4.3 Projetos de Pesquisa com Financiamento Externo .....
4.4 Estágios, Visitas Científicas e Outros .....
4.5 Participação em Reuniões Científicas Internacionais.....
4.6 Participação em Reuniões Científicas Nacionais .....
4.7 Prêmios e Outras Distinções .....
5 PRODUÇÃO CIENTÍFICA
5.1 Trabalhos Apresentados em Eventos Internacionais .....
5.2 Trabalhos Apresentados em Eventos Nacionais.....
5.3 Trabalhos Publicados em Periódicos de Divulgação Internacional e .....
com Árbitro.....
5.4 Trabalhos Submetidos para Publicação.....
5.5 Trabalhos Aceitos para Publicação.....
5.6 Publicação de Capítulos de Livros .....
5.7 Publicação de Artigo em Revista.....

1 COMPOSIÇÃO DO DEPARTAMENTO

1.1 Chefia:

Chefe	Suplente
SYLVIO ROBERTO ACCIOLY CANUTO (23.02.2004 a 22.02.2006)	MARÍLIA JUNQUEIRA CALDAS (23.02.2004 a 22.02.2006)

Chefe	Suplente
RENATO DE FIGUEIREDO JARDIM (23.02.2006 a 22.02.2008)	MARÍLIA JUNQUEIRA CALDAS (23.02.2006 a 22.02.2008)

1.2 Conselho Departamental:

PROFESSORES TITULARES (MS-6)
Adalberto Fazzio (1) Armando Corbani Ferraz (2) Carlos Castilla Becerra Guennadii Michailovich Gusev (3) (a partir de 23.11.2006) Hercílio Rodolfo Rechenberg Maria Cristina dos Santos Marília Junqueira Caldas Nei Fernandes de Oliveira Jr. (4) Renato de Figueiredo Jardim Sylvio Roberto Accioly Canuto

PROFESSORES ASSOCIADOS (MS-5) (26.10.2005 a 25.10.2007)	
Titulares	**Suplentes**
Valdir Bindilatti	André Bohomoletz Henriques
Lucy Vitória Credídio Assali	Guennadii Michailovich Gusev (3) (até 22.11.2006)
Helena Maria Petrilli	Antônio José Roque da Silva
Armando Paduan Filho	

PROFESSORES DOUTORES (30.03.2005 a 29.03.2007)	
Titulares	**Suplentes**
Carmen Silvia de Moya Partiti	Daniel Reinaldo Cornejo
Gerardo Fabián Goya (6)	Kazunori Watari
Luísa Maria Ribeiro Scolfaro (7)	Ewout Ter Haar

1.3 Corpo Docente:

PROFESSORES TITULARES (MS-6)

Adalberto Fazzio (1)	RDIDP
Armando Corbani Ferraz (2)	RDIDP
Carlos Castilla Becerra	RDIDP
Guennadii Michailovich Gusev (3)	RDIDP
Hercílio Rodolfo Rechenberg	RDIDP
Maria Cristina dos Santos	RDIDP
Marília Junqueira Caldas	RDIDP
Nei Fernandes de Oliveira Júnior (4)	RDIDP
Renato de Figueiredo Jardim	RDIDP
Sylvio Roberto Accioly Canuto	RDIDP

PROFESSORES ASSOCIADOS (MS-5)

André Bohomoletz Henriques	RDIDP
Antônio Domingues dos Santos	RDIDP
Antônio José Roque da Silva	RDIDP
Armando Paduan Filho	RDIDP
Euzi Conceição Fernandes da Silva (5)	RDIDP
Guennadii Michailovich Gusev (3)	RDIDP
Helena Maria Petrilli	RDIDP
Lucy Vitória Credidio Assali	RDIDP
Valdir Bindilatti	RDIDP

PROFESSORES DOUTORES (MS - 3)

Carmen Silvia de Moya Partiti	RDIDP
Daniel Reinaldo Cornejo	RDIDP
Ewout Ter Haar	RDIDP
Gerardo Fabián Goya (6)	RDIDP
Kazunori Watari	RDIDP
Luísa Maria Ribeiro Scolfaro (7)	RDIDP
Rafael Sá de Freitas (8)	RDIDP

(1) Designado para exercer a função de Vice-Diretor do Instituto de Física, com mandato de quatro anos, nos termos do artigo 46, § 2º do Estatuto da Universidade de São Paulo. Cerimônia de posse realizada em 20 de outubro de 2006. Publicação no Diário Oficial de 22 de setembro de 2006.

(2) No exercício da função de Pró-Reitor de Pós-Graduação, desde 20 de dezembro de 2005. Publicação no Diário Oficial de 22 de dezembro de 2005.

(3) Aprovado no concurso para o provimento de um Cargo de Professor Titular, Ref. MS-6, em RDIDP, junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica. A nomeação foi publicada no Diário Oficial de 23 de novembro de 2006.

(4) Designado para exercer a função de Coordenador Geral Pro-Tempore da Escola de Engenharia de Lorena da Universidade de São Paulo. Publicação no Diário Oficial de 09 de junho de 2006.

(5) Euzi Conceição Fernandes da Silva. Licença-Prêmio: 90 dias, a partir de 06 de março de 2006; 90 dias, a partir de 04 de junho de 2006; 90 dias, a partir de 02 de setembro de 2006.

(6) Afastamento de Longa Duração para realizar um estágio de pós-doutoramento no Instituto de Nanociência de Aragón (INA), em Zaragoza, na Espanha, no período de 15 de junho de 2005 a 14 de junho de 2006. Prorrogação do Afastamento, para dar prosseguimento às atividades, por mais um ano, no período de 15 de junho de 2006 a 14 de junho de 2007.

(7) Afastamento de Longa Duração para realizar uma visita de colaboração científica ao grupo de Física de Materiais e Dispositivos Semicondutores do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE, a convite do Prof. Dr. Eronides Felisberto da Silva, no período de 15 de janeiro a 13 de julho de 2006. Prorrogação do Afastamento, para dar prosseguimento às atividades, no período de 14 de julho de 2006 a 14 de janeiro de 2007.

(8) Aprovado em concurso para o provimento de um cargo de Professor Doutor, Ref. MS-3, em RDIDP, nos termos do artigo 77, parágrafo único do Estatuto da Universidade de São Paulo. Publicação da contratação no Diário Oficial de 13 de junho de 2006.

1.4 Pessoal Técnico e Administrativo:

TÉCNICO:

Carlos Alberto Barioni Eronides Alves de Almeida Flávio do Carmo Fontenelle Gilberto Francisco dos Santos (transferido da Marcenaria para a Seção de Criogenia, a partir de de 21 de março de 2006) José Geraldo Chagas

Luiz Carlos dos Santos Marcelo Maia Garcia (término do PROCONTES em 20 de junho de 2006) 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

ADMINISTRATIVO:

Secretária de Departamento:

Rosana Batista Gimenes Biz

Secretários de Grupos de Pesquisas/Laboratórios:

Cecília Aparecida Cavalheiro Maia	Grupo de Transição de Fase e Supercondutividade Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas
Tatiana Lacerda Costa	Laboratório de Novos Materiais Semicondutores
Iran Mamedes de Amorim	Laboratório de Materiais Magnéticos
Marisa Fernandes da Silva Sandra Regina Rodrigues Ribeiro	Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Contínuo:

Marcos de Oliveira Neves

2 ATIVIDADES DE ENSINO E FORMAÇÃO CIENTÍFICA

2.1 Disciplinas de Graduação Ministradas no Primeiro Semestre de 2006:

Adalberto Fazzio	Introdução à Física Atômica e Molecular	FNC 0315
André Bohomoletz Henriques	BÔNUS NOTURNO	
Antônio Domingues dos Santos	Métodos Experimentais em Física dos Materiais	FMT 2501
Antônio José Roque da Silva	Física Geral e Experimental para Engenharia I	FEP 2195

Armando Corbani Ferraz	AFASTADO	
Armando Paduan Filho	Laboratório de Mecânica	FEP 0254
Carlos Castilla Becerra	Física para Engenharia III	FGE 2203
Carmen Silvia de Moya Partiti	Introdução à Espectroscopia	FAP 0425
Daniel Reinaldo Cornejo	Física para Engenharia III	FAP 2292
Euzi Conceição Fernandes da Silva	LICENÇA-PRÊMIO	
Ewout Ter Haar	Introdução às Medidas em Física	FAP 0181
Gerardo Fabian Goya	AFASTADO	
Guennadii Michailovich Gusev	Mecânica (IME)	FAP 0153
Helena Maria Petrilli	Mecânica (IME)	FAP 0153
Hercílio Rodolfo Rechenberg	Laboratório de Física para Ciências Biológicas	FGE 1189
Kazunori Watari	Mecânica II	FMT 0306
Lucy Vitória Credidio Assali	BÔNUS NOTURNO	
Luísa Maria Ribeiro Scolfaro	AFASTADA	
Maria Cristina dos Santos	Física III (IQ)	FGE 2245
Marília Junqueira Caldas	Física para Ciências Biológicas I	FGE 1187
Nei Fernandes de Oliveira Jr.	BÔNUS NOTURNO	
Renato de Figueiredo Jardim	Laboratorio de Física Moderna	FNC 0377
Sylvio Roberto Accioly Canuto	Mecânica Quântica I	FMA 0404
Valdir Bindilatti	Física para Engenharia III	FAP 2292

2.2 Disciplinas de Graduação Ministradas no Segundo Semestre de 2006:

Adalberto Fazzio	Fundamentos da Mecânica (IQ)	FAP 0151
André Bohomoletz Henriques	Disciplina da Pós-Graduação - item 2.4	
Antônio Domingues dos Santos	Física Experimental V	FNC 0313
Antônio José Roque da Silva	Introdução à Física do Estado Sólido	FMT 0402
Armando Corbani Ferraz	AFASTADO	
Armando Paduan Filho	Laboratório de Mecânica	FEP 0254

Carlos Castilla Becerra	Física para Engenharia	FAP 2204
Carmen Silvia de Moya Partiti	Fenômenos Ondulatórios para Geociências	FGE 0294
Daniel Reinaldo Cornejo	Física Engenharia Elétrica IV	FAP 2293
Euzi Conceição Fernandes da Silva	LICENÇA-PRÊMIO	
Ewout Ter Haar	Física Experimental (IQ)	FGE 2255
Gerardo Fabian Goya	AFASTADO	
Guennadii Michailovich Gusev	Eletricidade I (IME e IQ)	FGE 0270
Helena Maria Petrilli	Fundamentos da Mecânica (IME)	FAP 0151
Hercílio Rodolfo Rechenberg	Física para Engenharia II	FEP 2196
Kazunori Watari	Física Matemática II	FMA 0307
Lucy Vitória Credidio Assali	Física I	FEP 0111
Luísa Maria Ribeiro Scolfaro	AFASTADA	
Maria Cristina dos Santos	Física IV (IQ)	FGE 2250
Marília Junqueira Caldas	Física dos Materiais	FMT 0502
Nei Fernandes de Oliveira Jr.	Termodinâmica I	FMT 0159
Rafael Sá de Freitas	Física para Engenharia II (carga dupla)	FEP 2196
Renato de Figueiredo Jardim	Fundamentos da Mecânica (IME)	FAP 0151
	Lab. de Física p/ Licenc. em Geociênciências	FMT 0112
Sylvio Roberto Accioly Canuto	BÔNUS NOTURNO	
Valdir Bindilatti	Física para Engenharia Elétrica IV	FAP 2293

2.3 Disciplinas de Pós-Graduação Ministradas no Primeiro Semestre de 2006:

Não houve		

2.4 Disciplinas de Pós-Graduação Ministradas no Segundo Semestre de 2006:

André Bohomoletz Henriques	Física do Estado Sólido	FMT 5814

2.5 Seminários Proferidos:

Coordenador dos Seminários do DFMT:
Prof. Dr. Rafael Sá de Freitas (a partir do segundo semestre de 2006)

Coordenadora dos Seminários Tópicos em Física da Matéria Condensada:
Profa. Dra. Carmen Silvia de Moya Partiti (a partir do segundo semestre de 2006)

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
"Simulation of Super-Hydrophobic Surfaces: A Nano-Lotus Effect?"
Prof. Dr. Florian Muller- Plathe
Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie, Technische Universität Darmstadt, Alemanha
Sala de Seminários José Roberto Leite - Edifício Alessandro Volta (Bloco C)
Data: 15.03.2006

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
"Transporte de Carga em Semicondutores Orgânicos"
Dr. Demétrio A. da Silva Filho
Georgia Institute of Technology School of Chemistry & Biochemistry Atlanta GA, Estados Unidos
Sala de Seminários José Roberto Leite - Edifício Alessandro Volta (Bloco C)
Data: 21.03.2006

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
"Condensação de Bose-Einstein de Magnons em $NiCl_2.4SC(NH_2)_2$"
Prof. Dr. Armando Paduan Filho, DFMT, IFUSP
Sala de Seminários José Roberto Leite - Edifício Alessandro Volta (Bloco C)
Data: 29.03.2006

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
"Bose-Einstein Condensation: An Ab Initio Many-Body Approach"
Prof. Dr. Tapan K. Das
Department of Physics, University of Calcutta, Índia
Sala de Seminários José Roberto Leite - Edifício Alessandro Volta (Bloco C)
Data: 19.04.2006

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
"Quantum Chemistry and Modern Photochemistry: DNA Nucleobases and the Conical Intersection Concept"
Dr. Luis Serrano-Andrés
Instituto de Ciencia Molecular, Universitat de Valéncia, Espanha
Sala de Seminários José Roberto Leite - Edifício Alessandro Volta (Bloco C)

Data: 11.08.2006
Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
"Theory of Electron States and Correlation at the Nanoscale"
Profa. Dra. Franca Manghi
INFM - National Research Center on nanoStructures and bioSystems at Surfaces
(S3), Universidade de Modena, Departamento de Física, Modena, Itália
Sala de Seminários José Roberto Leite - Edifício Alessandro Volta (Bloco C)
Data: 25.08.2006

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
"Solvent Effects on Molecular Properties and Spectroscopies: the Polarizable Continuum Model"
Profa. Dra. Benedeta Mennucci
Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale da Universita degli Studidi Pisa, Itália
Sala de Seminários José Roberto Leite - Edifício Alessandro Volta (Bloco C)
Data: 05.09.2006

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
"Difração de Pó de Alta Resolução como Sonda para Investigação de Efeitos Eletrônicos Cooperativos em Novos Materiais"
Prof. Dr. Eduardo Granado Monteiro da Silva
Instituto de Física Gleb Wataghin da UNICAMP, Campinas, SP
Sala de Seminários José Roberto Leite - Edifício Alessandro Volta (Bloco C)
Data: 26.09.2006

Seminário Tópico em Física da Matéria Condensada - DFMT
"Dicroísmo Circular Magnético em Calcógenos de Eu"
Maurício Alarcon Manfrino
Estudante de Mestrado, Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas, DFMT
Sala de Reuniões do Edifício Mário Schenberg
Data: 28.09.2006

Seminário Tópico em Física da Matéria Condensada - DFMT
"Sobre o Comportamento Magnético de Cristais Líquidos Ferronemáticos"
Prof. Dr. Daniel Reinaldo Cornejo
Laboratório de Materiais Magnéticos, DFMT
Sala de Reuniões do Edifício Mário Schenberg
Data: 25.10.2006

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
"Fazendo Química com Nanocristais: Criando Novos Materiais"
Prof. Dr. Edson Roberto Leite
Departamento de Química da Universidade Federal de São Carlos, SP
Sala de Seminários José Roberto Leite - Edifício Alessandro Volta (Bloco C)
Data: 22.11.2006

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
"Potenciais e suas Implicações Topológicas em Espectroscopia e Espalhamento Molecular Reactivo"
Prof. Dr. Antonio Joaquim Campos Varandas
Universidade de Coimbra, Coimbra, Portugal
Sala de Seminários José Roberto Leite - Edifício Alessandro Volta (Bloco C)
Data: 24.11.2006

Seminário Tópico em Física da Matéria Condensada - DFMT
"Micromagnetismo Experimental através do SNOM-MO"
Mariana Pojar
Estudante de Doutorado, Laboratório de Materiais Magnéticos, DFMT
Sala de Reuniões do Edifício Mário Schenberg
Data: 29.11.2006

Seminário informal do Laboratório de Materiais Magnéticos
"Micro e Nanosensores de Campo Magnético"
Dr. Luiz Carlos Sampaio Lima
CBPF - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, RJ
Sala de Reuniões do Edifício Mário Schenberg
Data: 1º.12.2006

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
"Dinâmica de Spins em Filmes e Nanopartículas Magnéticas investigada com Pulsos Laser de Femtossegundos"
Dr. Leandro H.F. Andrade
Centro de Lasers e Aplicações/IPEN - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Campus da USP, SP
Sala de Seminários José Roberto Leite - Edifício Alessandro Volta (Bloco C)
Data: 06.12.2006

Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
"Quantum Hall Ferromagnet at High filling Factors: A Magnetic Field induced Stoner Transition"
Dr. Benjamin A. Piot
Grenoble High Magnetic Field Laboratory, Centre
National de la Recherche Scientifique, Grenoble, France
Sala de Seminários José Roberto Leite - Edifício Alessandro Volta (Bloco C)
Data: 13.12.2006

Seminário Tópico em Física da Matéria Condensada - DFMT
"Efeitos de Superfície em Nanopartículas Magnéticas: Efeito Mössbauer com Campo Externo"
Prof. Dr. Hercílio Rodolfo Rechenberg
Laboratório de Materiais Magnéticos, DFMT
Sala de Reuniões do Edifício Mário Schenberg

Data: 18.12.2006
Seminário do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
"Study of Fe-doped TiO_2 and SnO by Hyperfine Techniques and Ab Initio Calculations"
Prof. Dr. Leonardo A. Errico
Departamento de Física - IFLP (CONICET) - Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, Argentina
Sala de Seminários José Roberto Leite - Edifício Alessandro Volta (Bloco C)
Data: 19.12.2006

2.6 Participação de Docentes em Comissões Organizadoras de Eventos:

Adalberto Fazzio

11th International Conference on the Formation of Semiconductor Interfaces
http://www.icfsi2007.com/
Manaus, Amazonas.
Período: de 19 a 24 de agosto de 2007.

29th International Conference on the Physics of Semiconductors
http://www.icps2008.org/
Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
Período: de 27 de julho a 1º de agosto de 2008.

Antônio José Roque da Silva

X Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica
http://www.sbf1.sbfisica.org.br/eventos/ebee/x/index.htm
Niterói, Rio de Janeiro.
Período: de 10 a 14 de julho de 2006.

13th BraziLian Workshop on Semiconductor Physics
http://www.fmt.if.usp.br/...BWSP13
Rebouças Convention Center.
São Paulo, São Paulo.
Período: de 1º a 05 de abril de 2007.

11th International Conference on the Formation of Semiconductor Interfaces
http://www.icfsi2007.com/
Manaus, Amazonas.
Período: de 19 a 24 de agosto de 2007.

Carmen Silvia de Moya Partiti

Latin American Conference on the Applications of the Mössbauer Effect - LACAME 2006
http://www.cbpf.br/~lacame06/
Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
Período: de 05 a 09 de novembro de 2006.

Helena Maria Petrilli

13th BraziLian Workshop on Semiconductor Physics
http://www.fmt.if.usp.br/...BWSP13
Rebouças Convention Center.
São Paulo, São Paulo.
Período: de 1º a 05 de abril de 2007.

XIV International Conference on Hyperfine Interactions
&
XVIII International Symposium on Nuclear Quadrupole Interactions
http://www.fisica.unlp.edu.ar/hfi2007/
Foz do Iguaçú, Paraná.
Período: de 05 a 10 de agosto de 2007.

Lucy Vitória Credidio Assali

13th BraziLian Workshop on Semiconductor Physics
http://www.fmt.if.usp.br/...BWSP13
Rebouças Convention Center.
São Paulo, São Paulo.
Período: de 1º a 05 de abril de 2007.

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

13th BraziLian Workshop on Semiconductor Physics
http://www.fmt.if.usp.br/...BWSP13
Rebouças Convention Center.
São Paulo, São Paulo.
Período: de 1º a 05 de abril de 2007.

11th International Conference on the Formation of Semiconductor Interfaces
http://www.icfsi2007.com/

Manaus, Amazonas.
Período: de 19 a 24 de agosto de 2007.

Marília Junqueira Caldas

24th International Conference on Defects in Semiconductors - ICDS-24
http://www.icds24.org/
Albuquerque, New México, USA.
Período: de 22 a 27 de julho de 2007.

Sylvio Roberto Accioly Canuto

XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada
http://www.sbf1.sbfisica.org.br/eventos/enfmc/xxix/
São Lourenço, Minas Gerais.
Período de 09 a 13 de maio de 2006.

II Encontro Nacional de Física Teórica e Computacional
http://www.ift.unesp.br/enftc/
Instituto de Física Teórica - UNESP
São Paulo, São Paulo.
Período: de 10 a 13 de abril de 2007.

2.7 Projetos de Pós-Doutorado:

Concluídos e em andamento

Dr. **Alcione Roberto Jurelo**
Grupo de Transição de Fase e Supercondutividade
Supervisor: Prof. Dr. Renato de Figueiredo Jardim
Título do Projeto: Preparação e Caracterização de Cupratos Supercondutores com Base em Rutênio (Ru-1212).
Bolsa CNPq - Proc. 150845/2003-9
Primeira Vigência: 1° de março de 2005 - 28 de fevereiro de 2006.

Dra. **Ana Lúcia Brandl**
Laboratório de Materiais Magnéticos (LMM)
Supervisor: Prof. Dr. Gerardo Fabián Goya
Título do Projeto: Estudo das Propriedades Magnéticas de Nanopartículas Biocompatíveis de Gamma Fe_2O_3 e Fe_3O_4.
Bolsa FAPESP - Proc. nº 2004/01474-7
Processo USP nº 2004.1.23415.1.6.

Primeira Vigência: 1º de julho de 2004 - 30 de junho de 2005.
Segunda Vigência: 1º de julho de 2005 - 30 de junho de 2006.
Solicitação de cancelamento a partir de 13 de junho, em virtude de sua aprovação em concurso público.

Dra. **Ana Melva Champi Farfán**
Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS)
Supervisor: Prof. Dr. Guennadii Michailovich Gusev
Título do Projeto: Novos Materiais para Aplicações em Spintrônica, incluindo o Grafeno.
Bolsa FAPESP - Proc.nº 2006/58024-9
Processo USP nº 2007.1.4617.1.9
Primeira Vigência: 1º de dezembro de 2006 - 30 de novembro de 2007

Dr. **Celso de Araújo Duarte**
Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS)
Supervisor: Prof. Dr. Guennadii Michailovich Gusev
Título do Projeto: Pontos Quânticos para Computação Quântica.
Bolsa FAPESP - Proc.nº 2005/04592-3
Processo USP nº 2006.1.1441.43.1
Primeira Vigência: 1º de setembro de 2006 - 31 de agosto de 2007

Dr. **Ênio Lima Jr.**
Laboratório de Materiais Magnéticos (LMM)
Supervisor: Prof. Dr. Gerardo Fabián Goya
Título do Projeto: Molecule-Based Synthesis of Nanophase Materials: Magnetic Interactions in Nanoparticles and Films.
Outorgante: DFMT-IFUSP (convênio entre o IFUSP e o Institüt für Neue Materialien - Saabrücken - Alemanha).
Processo USP nº 2004.1.6701.1.4
Primeira Vigência: 1º de fevereiro de 2004 - 30 de janeiro de 2005
Segunda Vigência: 1º de fevereiro de 2005 - 30 de janeiro de 2006

Dr. Ênio Lima Jr.
Laboratório de Materiais Magnéticos (LMM)
Supervisor: Prof.Dr. Hercílio Rodolfo Rechenberg
Título do Projeto: Síntese por Métodos Químicos e Caracterização de Nanopartículas Magnéticas.
Bolsa FAPESP - Proc. nº 2006/04783-6
Processo USP nº
Primeira Vigência: 1º de dezembro de 2006 - 30 de novembro de 2007

Dr. **Ernesto Govea-Alcaide**
Grupo de Transição de Fase e Supercondutividade
Supervisor: Prof. Dr. Renato de Figueiredo Jardim

Título do Projeto: Estudo da Influência da Pressão de Compactação nas Propriedades Supercondutoras e no Estado Normal de Supercondutores dos Sistemas.
(Bi-Pb)-Sr-Ca-Cu-O e Y-Ba-Cu-O
Bolsa FAPESP - Proc. nº 2006/50192-0
Processo USP nº 2006.1.1307.43.3
Primeira Vigência: 1º julho de 2006 - 30 de junho de 2007

Dr. **Herbert de Castro Georg**
Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais
Supervisor: Prof. Dr. Sylvio Roberto A. Canuto
Título do Projeto: Estudo dos Efeitos de Solventes em Moléculas Altamente Polarizáveis utilizando Técnicas de Simulação Computacional e Cálculos Quânticos
Bolsa FAPESP - Proc. nº 2005/60058-6
Processo USP nº 2006.1.1305.43.0
Primeira Vigência: 1º de agosto de 2006 - 31 de julho de 2007

Dr. **Marcelo Marques**
Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS)
Supervisor: Prof. Guennadii M. Gusev (a partir de julho de 2005)
Título do Projeto: Estudo Teórico de Materiais para Aplicação Spintrônica.
Bolsa FAPESP - Proc. nº 2004/11822-2
Processo USP nº 2005.1.26282.1.8
Primeira Vigência: 1º de junho de 2005 - 31 de maio de 2006

Dr. **Ronaldo Giro**
Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais
Supervisora: Profa. Dra. Marília Junqueira Caldas
Título do Projeto: Estudo da Interface entre Metal e Polímero em Dispositivos Orgânicos emissores de Luz.
Bolsa FAPESP - Proc. nº 2003/12350-4
Processo USP nº 2004.1.9352.1.0
Primeira Vigência: 1º de abril de 2004 - 31 de março de 2005
Segunda Vigência: 1º de abril de 2005 - 31 de março de 2006
Segunda Vigência: 1º de abril de 2006 - 31 de março de 2007

Dr. **Tomás Erikson Lamas**
Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS)
Supervisor: Prof. Dr. Guennadii Michailovich Gusev
Título do Projeto: Crescimento e Aplicação de Pontos Quânticos de InAs Auto-Organizados emitindo em 1,3 e 1,55 Micrômetros.
Bolsa FAPESP - Proc. nº 03/09398-5
Processo USP nº 2004.1.21658.1.9
Primeira Vigência: 1º de junho de 2004 - 31 de maio de 2005
Segunda Vigência: 1º de junho de 2005 - 31 de maio de 2006
Solicitou o cancelamento da bolsa, a partir de 18 de abril de 2006.

Dr. **Vagner Bernal Barbeta**
Grupo de Transição de Fase e Supercondutividade
Supervisor: Prof. Dr. Renato de Figueiredo Jardim
Título do Projeto: Estudo da Transição de Fase Metal-Isolante em Compostos da Família $RNi)_3$(R=Terra Rara).
Período: 1° de fevereiro de 2005 - 31 de dezembro de 2006.
Sem vínculo com o Programa de Pós-Doutorado da Universidade de São Paulo

Dr. **Valdemir Enéias Ludwig**
Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais
Supervisor: Prof. Dr. Sylvio Roberto A. Canuto
Título do Projeto: Efeitos de Solvente em Fotoisomerismo Molecular.
Bolsa FAPESP - Proc. n° 2004/12324-6
Processo USP n° 2005.1.26283.1.4
Primeira Vigência: 1° de julho de 2005 - 30 de junho de 2006
Segunda Vigência: 1° de julho de 2006 - 30 de junho de 2007

Dr. **Xavier Gratens**
Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas (LESBT)
Supervisor: Prof. Dr. Valdir Bindilatti
Título do Projeto: Estudo das Propriedades Ópticas, Elétricas e Magnéticas de Estruturas de Semicondutores Magnéticos Diluídos de Compostos IV-VI crescidas por MBE.
Bolsa CNPq - Proc. n° 150547/2004-8
Processo USP n° 2004.1.23414.1.0
Primeira Vigência: 1° de julho de 2004 - 30 de junho de 2005
Segunda Vigência: 1° de julho de 2005 - 30 de junho de 2006

2.8 Doutorados:

Concluídos:

"Nanoestruturas: Propriedades Estruturais, Eletrônicas e de Transporte de Carga"
Frederico Dutilh Novaes
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Adalberto Fazzio
Data: 25.05.2006

"Propriedades Estruturais e Eletrônicas de Heterofulerenos em Superfícies"
Ivana Zanella da Silva
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Antônio José Roque da Silva
Data: 28.06.2006

“Magnetização Remanescente em Sistemas Antiferromagnéticos”
Zulmara Virginia de Carvalho
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Carlos Castilla Becerra
Data: 17.03.2006

“Propriedades Magnéticas e de Spins em Semicondutores do Grupo III-V”
Celso de Araújo Duarte
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Guennadii Michailovich Gusev
Data: 19.06.2006

“Efeitos do Meio em Propriedades Conformacionais e Eletrônicas de Moléculas”
Herbert de Castro Georg
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientadora: Kaline Rabelo Coutinho
Data: 10.07.2006

“Estudos das Propriedades Termodinâmicas e Eletrônicas em Manganitas”
José Antonio de Souza
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Renato de Figueiredo Jardim
Data: 15.03.2006

“Estabilidade Isomérica e Ligações de Hidrogênio em Agregados e Líquidos Molec”
Thaciana Valentina Malaspina Fileti
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto
Data: 09.08.2006

Em Andamento:

“Estudo Teórico da Adsorção de Átomos e Moléculas em Superfícies de Cristais do Tipo IV e IV-IV”
Jeverson Teodoro Arantes Jr.
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Adalberto Fazzio

“Correções de Auto-Interação no Transporte Eletrônico”
Matheus Paes Lima
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Adalberto Fazzio

“Estudo de Transporte em Sistemas Nanoestruturados via Cálculo Ab Initio”
Thiago Barros Martins
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Adalberto Fazzio

“Transporte em Nanofios de Si”
Vagner Alexandre Rigo
Fonte Financiadora: CAPES/PROCAD (USP/UFSM)
Orientador: Adalberto Fazzio

“Orientação Óptica de Spin Eletrônico em Semicondutores Magnéticos”
Giovanni Decot Galgano
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Andre Bohomoletz Henriques (a partir de outubro)

“Estudo de Materiais Magnéticos em Escala Micro e Nanoscópica através do SNOM-MO”
Mariana Pojar
Fonte Financiadora: CAPES
Orientador: Antônio Domingues dos Santos

“Anisotropia Estrutural e Magnética em Filmes Finos e Multicamadas por Espectroscopia de Absorção e Refletividade no Domínio dos Raios X”
Narcizo Marques de Souza Neto
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Antônio Domingues dos Santos

“Estudo Teórico de Nanofios Semicondutores”
Cedric Rocha Leão
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Antônio José Roque da Silva

“Estudo Teórico da Evolução Dinâmica de Nanofios de Prata e Ouro Puros e com Impurezas”
Edwin Hobi Jr.
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Antônio José Roque da Silva

“Estudo da Metodologia de Cálculo Híbrida DFT-QM/MM e Aplicações em Nanotecnologia”
Gustavo Troiano Feliciano
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Antônio José Roque da Silva

“Estudo da Difusão de Hidrogênio em Nanotubos de Carbono via Cálculos Ab Initio”
Leandro de Andrade Silva
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Antônio José Roque da Silva

“Simulações à Temperatura Finita utilizando Cálculos de Energia Total Ab Initio”
Luana Sucupira Pedroza
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Antônio José Roque da Silva

“Estudo Teórico de Dispositivos Moleculares”
Renato Borges Pontes
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Antônio José Roque da Silva

“Estudo de Defeitos em Nanotubos de Carbono”
Rodrigo Garcia Amorim
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Antônio José Roque da Silva

“Processos Eletrônicos Relacionados a Adsorção e Dissociação Molecular em Superfícies Semicondutoras”
Ferenc Diniz Kiss
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Armando Corbani Ferraz

“Caracterização de Sedimentos e Solos por Espectroscopia Mössbauer”
Fábio de Oliveira Jorge
Fonte Financiadora: sem bolsa
Orientador: Carmen Silvia de Moya Partiti

“Estrutura e Propriedades de Nanopartículas preparadas via SOL-GEL”
Javier Buastamante Mamani
Fonte Financiadora: CAPES
Co-orientadora: Carmen Silvia de Moya Partiti / Orientador: Giancarlo Espósito de Souza Brito (DFAP)

“Estudo de Fenômenos Magnéticos Mesoscópicos em Redes Auto-Organizadas de Nanofios de Ni, Fe e Co”
Thiago Ribeiro Fonseca Peixoto
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Daniel Reinaldo Cornejo

“Propriedades de Poços Quânticos de AlGaN/GaN”

Ángela Maria Ortiz de Zevallos Marquez
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Guennadii Michailovich Gusev

"Caracterização de Heteroestruturas Semicondutoras utilizadas na Fabricação de Fotodetectores operando na Faixa de Micrômetros"
Ivan Ramos Pagnossin
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Guennadii Michailovich Gusev

"Estudo das Instabilidades de Densidade de Spin em Nanoestruturas Semicondutoras"
Luis Enrique Gómez Armas
Fonte Financiadora: Convênio CNPq/CLAF
Orientador: Guennadii Michailovich Gusev

"Magnetotransporte em Poços Quânticos de AlGaAs/GaAs com Diferentes Formas de Potencial"
Niko Churata Mamani
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Guennadii Michailovich Gusev

"Propriedades Eletrônicas de Biomoléculas com Potenciais Aplicações em Dispositivos Eletrônicos Biomoleculares"
Marcos Brown Gonçalves
Fonte Financiadora: CNPq
Orientadora: Helena Maria Petrilli

"Diagrama de Fases do Sistema Fe-Cr-Al a partir de Cálculos de Estrutura Eletrônica Ab Initio"
Ney Sodré dos Santos
Fonte Financiadora: CAPES
Orientadora: Helena Maria Petrilli

"Propriedades Magnéticas dos Compostos Pseudo binários de Laves $Nb[Fe(1-x)Cr(x)]_2$ e $Hf[Fe(1-x)Cr(x)]_2$"
Rafael Alejandro Cajacuri Merino
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Hercílio Rodolfo Rechenberg

"Propriedades Eletrônicas, Magnéticas e Termodinâmicas de Ligas de (Ga, Mn)N"
Joelson Cott Garcia
Fonte Financiadora: CAPES
Orientadora: Lara Kühl Teles (até agosto)

"Propriedades Físicas de Diamondoids"

Joelson Cott Garcia
Fonte Financiadora: CAPES
Orientadora: Lucy Vitória Credidio Assali (a partir de agosto)

“Propriedades Físicas de Impurezas relacionadas com Níquel e Cobalto em Diamante”
Rolando Larico Mamani
Fonte Financiadora: CNPq
Orientadora: Lucy Vitória Credidio Assali

“Relações Estrutura/Propriedades de Compósitos de Nanotubos de Carbono e Polímeros Conjugados”
Jeconias Rocha Guimarães
Fonte Financiadora: CNPq
Orientadora: Maria Cristina dos Santos

“Quimissorção de Compostos Orgânicos em Superfícies de H:Si(111) Oxidadas”
Henady Malarenko Junior
Fonte Financiadora: sem bolsa
Orientadora: Marília Junqueira Caldas

“Estudo da Interface Polímero-Substrato em Eletrônica Molecular”
Marcelo Alves dos Santos
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientadora: Marília Junqueira Caldas

“Estudo Teórico de Montagens Supramoleculares: Orgânicos Conjugados sobre Si e SiO_2”
Regina Lélis de Sousa
Fonte Financiadora: CAPES
Orientadora: Marília Junqueira Caldas

“Superparamagnetismo em Compósitos de Ni:SiO_2”
Sueli Hatsumi Masunaga
Fonte Fianciadora: CNPq
Orientador: Renato de Figueiredo Jardim

“Utilização de Simulação Computacional para Estudar Segregação Molecular em Líquidos de Misturas Binárias”
Moisés Román Parisuaña Ito
Fonte Financiadora: CLAF
Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

“Efeitos de Solvente em Propriedades Estruturais e Eletrônicas de Moléculas em Meios Líquidos. Efeitos de Polarização e Mudanças Conformacionais”
Rafael Carvalho Barreto
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto

2.9 Mestrados:

Concluídos:

"Método de Monte Carlo utilizando Cálculos de Energia Total Ab Initio"
Luana Sucupira Pedroza
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Antônio José Roque da Silva
Data: 24.08.2006

"Estudo da Adsorção da Molécula de H2S sobre a Superfície InP(001)"
Sandro Inácio de Souza
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Armando Corbani Ferraz
Data: 06.03.2006

"Efeitos de Etado Sólido e Ligações de Hidrogênio sobre o Gradiente de Campo Elétrico no Núcleo no Imidazol"
Marcos Brown Gonçalves
Fonte Financiadora: sem bolsa
Orientadora: Helena Maria Petrilli
Data: 17.10.2006

"Estudos dos Compostos Semicondutores de Metais de Transição - Grupo V para Aplicação em Spintrônica"
Mauro Fernando Soares Ribeiro Jr.
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Luiz Guimarães Ferreira
Data: 07.12.2006

"Estudo Ab Initio de Fulerenos C_{50} e C_{60} e seus Derivados para Aplicações em Eletrônica Molecular"
Lucas Viani
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientadora: Maria Cristina dos Santos
Data: 16.11.2006

"Modelos para o Transporte Eletrônico em Filmes Orgânicos Desordenados"
Marcelo Maia Garcia
Fonte Financiadora: sem bolsa
Orientadora: Marília Junqueira Caldas
Data: 15.05.2006

“Propriedades Eletrônicas de Líquidos Homogêneos”
Rafael Carvalho Barreto
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto
Data: 14.11.2006

Em Andamento:

“Adsorção de Moléculas em Nanofios Semicondutores”
José Eduardo Padilha de Souza
Fonte Financiadora: CAPES
Orientador: Adalberto Fazzio

“Interação de Exchange e Éxcitons Magnéticos de Spin polarizado em Calcógenos de Európio”
Maurício Alarcon Manfrini
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: André Bohomoletz Henriques

“Divacâncias em Nanofitas de Grafeno”
Alberto Torres Riera Júnior
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Antônio José Roque da Silva

“Estudo de Propriedades Vibracionais de Defeitos em Nanotubos”
Leandro de Andrade Silva
Fonte Financiadora: CNPq
Orientador: Antônio José Roque da Silva

“Estudo Teórico de Sensores Baseados em Nanotubos CN_x, utilizando Cálculos Ab Initio”
Mariana Rossi Carvalho
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Antônio José Roque da Silva

“Estudo Experimental e Teórico de Exchange-Bias em Multicamadas Heterogêneas Nanoestruturadas”
Leonardo Alonso
Fonte Financiadora: CAPES
Orientador: Daniel Reinaldo Cornejo

“Interações Magnéticas e Magneto-Impedância em Redes de Nanofios de Metais de Transição”
Charles da Rocha Silva
Fonte Financiadora : CAPES
Orientador: Daniel Reinaldo Cornejo

“Investigação da strutura eletrônica de poços quânticos com dopagem planar na barreira utilizando o efeito Shubnikov–de Haas”
Sérgio Takimoto Maurício
Fonte Financiadora: sem bolsa
Orientadora: Euzi Conceição Fernandes da Silva

“Propriedades Magnéticas em Nanopartículas de Óxidos $YFeO_3$ e Fe_3O_4”
Waldir Leles Martins Filho
Fonte Financiadora - CNPq
Orientador: Gerardo Fabián Goya
Obs.: matrícula trancada

“Efeitos de Spin em Poços Quânticos Largos”
Alvaro Diego Bernardino Maia
Fonte Financiadora: sem bolsa
Orientador: Guennadii Michailovich Gusev

“Síntese e Caracterização de Nanopartículas Magnéticas Monodispersas”
Amanda Defendi Arelaro
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Hercílio Rodolfo Rechenberg (a partir de 1º de agosto)

“Estudo Teórico de Modificiações Estruturais em Materiais Semicondutores em Presença de Campo Elétrico Externo”
Marco Aurélio Poles de Souza
Financiadora: sem bolsa
Orientadora: Lucy Vitória Credidio Assali
Obs.: matrícula trancada

“Estudo Teórico de Superfícies de Diamante funcionalizadas”
Rodrigo Ramos da Silva
Fonte Financiadora: CNPq
Orientadora: Marília Junqueira Caldas

“Propriedades Eletrônicas de Polímeros da Família dos Fluorenos”
Marcelo Luiz da Silva
Fonte Financiadora: CAPES
Orientadora: Marília Junqueira Caldas

“Medidas de Transporte sob Pressão em Compostos com Transições de Fase Tipo Metal-Isolante”
Solange de Andrade
Financiadora: CNPq
Orientador: Renato de Figueiredo Jardim

2.10 Projetos de Iniciação Científica:

"Construção de um Polarizador Circular"
Giovanni Decot Galgano
Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC
Orientador: Andre Bohomoletz Henriques (até setembro)
Ano: 2006

"Otimização do Sistema de Ressonância da Ponta em Microscópios Ópticos de Varredura em Campo Próximo"
Erik Aragão Vermot
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Antônio Domingues dos Santos
Ano: 2006

"Produção e Caracterização Magnética e Estrutural de Nanopartículas Magnéticas"
Gabriel Teixeira Landi
Fonte Financiadora: não há
Orientador: Antônio Domingues dos Santos
Ano: 2006

"Estudo dos Plasmons de Superfície em Nanopartículas de Metais Nobres em Matriz Dielétrica ou Metálica"
Maria Fernanda Araújo de Rezende
Fonte Financiadora: não há
Orientador: Antônio Domingues dos Santos
Ano: 2006

"Produção e Caracterização Ótica de Nanopartículas de Metais Nobres em Matriz Dielétrica"
Roberto Isamu Ono Filho
Fonte Financiadora: não há
Orientador: Antônio Domingues dos Santos
Ano: 2006

"Estudo de Sistemas Magnéticos em Altos Campos e Baixas Temperaturas"
Olímpio Ribeiro da Fonseca Neto
Fonte Financiadora: sem bolsa
Orientador: Armando Paduan Filho
Ano: 2006

"Obtenção e Estudo de Propriedades Magnéticas de Arranjos Auto-organizados de Nanofios de Permalloy"
Fabiana Rodrigues Arantes
Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC
Orientador: Daniel Reinaldo Cornejo
Ano: 2006

"Estudo do Magnetismo em Nanopartículas de Fe_3O_4 em Ferrofluidos"
Amanda Defendi Arelaro
Fonte Financiadora: FAPESP
Orientador: Hercílio Rodolfo Rechenberg
Ano: 2006

"Obtenção e Estudo de Coercividade de Bicamadas e Pós Heterogêneos de MnO-MT (MT = Fe, Co, Ni)"
Felipe Belonsi de Cintra
Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC
Orientador: Hercílio Rodolfo Rechenberg
Ano: 2006

"Nanoestrutura de Carbono: Diamondoids (indo além de nanotubos e "Buckballs")"
Gabriela Iunes Depetri
Fonte Financiadora: sem bolsa
Orientadora: Lucy Vitória Credidio Assali
Ano: 2006

"Estudo Teórico da Interação de Solventes com Nanotubos de Carbono"
Elton José Figueiredo de Carvalho
Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC
Orientadora: Maria Cristina dos Santos
Ano: 2006

"Iniciação ao Estudo de Estrutura Eletrônica: Sistemas Conjugados"
Leonardo Matheus Marion Jorge
Fonte Financiadora: CNPq/PIBIC
Orientadora: Marília Junqueira Caldas
Ano: 2006

3 ATIVIDADES DE EXTENSÃO E GESTÃO ACADÊMICA

3.1 Atividades Administrativas Institucionais:

Adalberto Fazzio
Membro da Congregação do IFUSP.
Membro do Conselho do Departamento.
Membro do Conselho Técnico Administrativo.
Presidente da Sociedade Brasileira de Física.
Vice-Diretor do IFUSP (mandato: de 20.10.2006 a 19.10.2010).

André Bohomoletz Henriques
Membro Suplente da Congregação do IFUSP (mandato: de 30.06.2005 a 29.06.2007).
Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 26.10.2005 a 25.10.2007).

Antônio Domingues dos Santos
Coordenador do Projeto A Universidade e as Profissões, a convite da Comissão de Cultura e Extensão do IFUSP.
Membro da Comissão Gestora dos Laboratórios Didáticos do IFUSP.
Membro da Congregação do IFUSP (mandato: de 30.06.2006 a 29.06.2007).
Representante Suplente do Departamento junto à Comissão de Pesquisa do IFUSP (mandato: de 22.11.2005 a 21.11.2007).

Antônio José Roque da Silva
Editor do BIFUSP - Boletim Informativo do Instituto de Física, publicado semanalmente (a partir de março).
Membro da Congregação do IFUSP (mandato: de 30.06.2005 a 29.06.2007).
Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 26.10.2005 a 25.10.2007).
Representante do Departamento junto à Comissão da Biblioteca (mandato: de 03.10.2004 a 02.10.2006).
Representante do Departamento junto à Comissão de Pesquisa do IFUSP (mandato: de 22.11.2005 a 21.11.2007).
Suplente do Presidente da Comissão de Pesquisa do IFUSP (mandato: de 12.12.2005 a 11.12.2007).

Armando Corbani Ferraz

Membro da Congregação do IFUSP.

Membro do Conselho Diretor da Escola de Engenharia de Lorena da Universidade de São Paulo (a partir de 15.12.2006).

Membro do Conselho do Departamento.

Membro do Conselho Universitário da USP (mandato: a partir de dezembro de 2005).

Membro Titular da Comissão de Claros da Reitoria da USP (mandato: a partir de dezembro de 2005).

Membro Titular da Comissão de Cooperação Internacional da USP (mandato: a partir de dezembro de 2005).

Membro Titular do Conselho Superior do Sistema Integrado de Saúde da USP - SISUSP (mandato: a partir de dezembro de 2005).

Presidente da Comissão Central do Programa de Aperfeiçoamento de Ensino da USP - PAE (mandato: a partir de dezembro de 2005).

Presidente do Conselho de Pós-Graduação da USP (mandato: a partir de dezembro de 2005).

Pró-Reitor de Pós-Graduação da USP (mandato: de 20.12.2005 a 19.12.2009).

Armando Paduan Filho
Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 26.10.2005 a 25.10.2007).
Representante do Departamento junto à Comissão de Apoio Profissional (mandato: de 02.03.2004 a 1º.03.2006).
Representante do Departamento junto à Comissão de Segurança do IFUSP (mandato: a partir de 05.10.2006).
Representante Suplente do Departamento junto à Comissão Assessora de Recursos Humanos (a partir de 11 de setembro de 2006).
Representante Suplente do Departamento junto à Comissão de Consultorias e Convênios (mandato: de 29.03.2005 a 28.03.2007).

Carlos Castilla Becerra
Membro da Congregação do IFUSP.
Membro do Conselho do Departamento.

Carmen Silvia de Moya Partiti
Comissão Coordenadora do Curso de Licenciatura em Matemática do Instituto de Matemática e Estatística da USP, a partir de março de 1998.
Membro da Congregação do IFUSP (mandato: de 30.06.2005 a 29.06.2007).
Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 30.03.2005 a 29.03.2007).
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.
Representante Suplente do Departamento junto à Comissão da Biblioteca (mandato: de 03.10.2006 a 02.10.2008).

Daniel Reinaldo Cornejo
Membro Suplente da Congregação do IFUSP (mandato: de 30.06.2005 a 29.06.2007).
Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 30.03.2005 a 29.03.2007).
Representante do Departamento junto à Comissão Assessora de Recursos Humanos (a partir de 11 de setembro de 2006).

Ewout Ter Haar
Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 30.03.2005 a 29.03.2007).
Representante do Departamento junto à Comissão de Apoio Profissional - CAP (mandato: de 07.08.2006 a 06.08.2008).

Gerardo Fabián Goya
Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 30.03.2005 a 29.03.2007).
Representante Suplente do Departamento junto à Comissão da Biblioteca (mandato: de 03.10.2004 a 02.10.2006).

Guennadii Michailovich Gusev
Membro do Conselho do Departamento (como Professor Titular) (a partir de 23.11.2006).
Membro Suplente da Congregação do IFUSP (mandato: de 30.06.2005 a 29.06.2007).
Membro Suplente do Conselho do Departamento (como Professor Associado, até 22.11.2006) (mandato: de 26.10.2005 a 25.10.2007).
Representante do Departamento junto à Comissão da Biblioteca (mandato: de 03.10.2006 a 02.10.2008).

Helena Maria Petrilli
Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 26.10.2005 a 25.10.2007).
Membro Suplente da Congregação do IFUSP (mandato: de 30.06.2005 a 29.06.2007).

Representante do Departamento junto à Comissão de Avaliação de Disciplinas - CAD do IFUSP (mandato: de 27.04.2006 a 26.04.2007).
Representante do Departamento junto à Comissão de Consultorias e Convênios (mandatos: de 29.03.2005 a 28.03.2007).
Representante do Departamento junto à Comissão de Segurança do IFUSP (mandato: de 07.06.2002 a 04.10.2006).
Representante Suplente do Departamento junto à Comissão de Graduação (mandato: de 25.11.2005 a 24.11.2008).

Hercílio Rodolfo Rechenberg
Membro da Congregação do IFUSP.
Membro do Conselho do Departamento.
Representante do Departamento junto à Comissão de Graduação do IFUSP (mandato: 25.11.2005 a 24.11.2008).
Suplente da Presidente da Comissão de Graduação do IFUSP (mandato: 06.03.2006 a 05.03.2008).

Kazunori Watari
Membro Suplente do Conselho do Departamento (mandato: de 30.03.2005 a 29.03.2007).
Representante Suplente do Departamento junto à Comissão de Informática do IFUSP (mandato: 23.08.2005 a 22.08.2007).

Lucy Vitória Credidio Assali
Membro do Conselho Diretor do Laboratório de Computação Científica Avançada (LCCA) da Universidade de São Paulo. Processo USP nº 96.1.71.70.3. Portaria nº 1225 de 10.07.2006 (publicado no D.O. em 15.07.2006).

Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 26.10.2005 a 25.10.2007).

Membro Suplente da Congregação do IFUSP (mandato: de 30.06.2005 a 29.06.2007).

Representante da Comissão de Pós-Graduação do IFUSP junto à Comissão Coordenadora do Programa de Aperfeiçoamento de Ensino (PAE) (mandato: de 06.04.2006 a 29.04.2007).

Representante do Departamento junto à Comissão de Pós-Graduação do IFUSP, em substituição ao Prof. Dr. Armando Corbani Ferraz (mandato: de fevereiro de 2006 a 29.04.2007).

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

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro
Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 30.03.2005 a 29.03.2007).

Maria Cristina dos Santos
Membro da Congregação do IFUSP.
Membro do Conselho do Departamento.

Marília Junqueira Caldas
Membro da Congregação do IFUSP.
Membro do Conselho do Departamento.
Membro Suplente do Conselho Técnico Administrativo do IFUSP (mandato: de 23.02.2004 a 22.02.2006 e de 23.02.2006 a 22.02.2008).
Presidente do Conselho Diretor do Laboratório de Computação Cientifica Avançada - LCCA/CCE/USP (mandato: de outubro de 2000 a junho de 2006).
Representante do Departamento junto à Comissão Assessora de Cultura e Extensão Universitária do IFUSP. Portaria IF 07/04 de 28.05.2004 (a partir de 28.05.2004).
Representante do IFUSP junto ao Centro Interunidades de História da Ciência (mandato: a partir de janeiro de 2003).
Suplente do Chefe do Departamento (mandatos: de 23.02.2004 a 22.02.2006 e de 23.02.2006 a 22.02.2008).
Suplente do Presidente da Comissão Assessora de Cultura e Extensão Universitária do IFUSP.

Nei Fernandes de Oliveira Jr.
Coordenador do Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas.
Coordenador Geral Pro-Tempore da Escola de Engenharia de Lorena da Universidade de São Paulo (a partir de junho de 2006)
Membro da Congregação do IFUSP.
Membro do Conselho Diretor da Escola de Engenharia de Lorena da Universidade de São Paulo (a partir de 15.12.2006).
Membro do Conselho do Departamento.
Representante da Congregação do IFUSP junto ao Conselho Universitário (mandato: de fevereiro de 2006 a fevereiro de 2010).

Rafael Sá de Freitas
Coordenador dos Seminários do Departamento (a partir de agosto de 2006).

Renato de Figueiredo Jardim
Chefe do Departamento (mandato: de 23.02.2006 a 22.02.2008).
Membro da Câmara de Avaliação do Conselho de Graduação da Universidade de São Paulo.
Membro da Câmara Curricular e do Vestibular do Conselho de Graduação da Universidade de São Paulo.
Membro da Comissão de Coordenação do Bacharelado (CoC-B) do IFUSP.
Membro da Congregação do IFUSP.
Membro do Conselho de Graduação da Universidade de São Paulo.
Membro do Conselho do Departamento.
Membro do Conselho Técnico Administrativo do IFUSP (mandato: de 23.02.2006 a 22.02.2008).

Sylvio Roberto Accioly Canuto
Chefe do Departamento (mandato: de 23.02.2004 a 22.02.2006).
Membro da comissão Diretora de Ciências Moleculares.
Membro da Congregação do IFUSP.
Membro do Conselho do Departamento.
Membro do Conselho Técnico Administrativo do IFUSP (mandato: de 23.02.2004 a 22.02.2006).
Membro Titular do Conselho da Sociedade Brasileira de Física.

Valdir Bindilatti
Membro do Conselho do Departamento (mandato: de 26.10.2005 a 25.10.2007).
Representante do Departamento junto à Comissão de Avaliação de Disciplinas - CAD do IFUSP (mandato: de 29.04.2006 a 28.04.2007).
Representante do Departamento junto à Comissão de Informática do IFUSP (mandato: de 23.08.2005 a 22.08.2007).
Representante Suplente do Departamento junto à Comissão de Pós-Graduação do IFUSP (mandato: de 30.04.2004 a 29.04.2007).

3.2 Assessorias e Consultorias (inclusive arbitragens para revistas):

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

Consultor da área de Ciências Físicas da Academia Brasileira de Ciências.

André Bohomoletz Henriques
Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, CNPq e CAPES.
Arbritagem para: Journal of Applied Physics, Physical Review B e Physical Review Letters.

Antônio Domingues dos Santos
Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.

Antônio José Roque da Silva
Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.
Arbitragem para: Brazilian Journal of Physics e International Journal of Modern Physics B, Physical Review B, Physical Review Letters, Solid State Communications e Journal of Applied Physics.

Armando Corbani Ferraz
Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, CNPq, CAPES, FAPEMIG e MCT.
Atuação como Árbitro: Applied Surface Science, Brazilian Journal of Physics, International Journal of Quantum Chemistry, Journal of Physics: Condensed Matter, Physical Review B, Solid State Communications, Surface Science, Physical Review Letters, Journal of Chemical Physics e Journal of Physical Chemistry B.

Armando Paduan Filho
Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, CNPq e CAPES.
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
Capes, CNPq e FAPEMIG.

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

Daniel Reinaldo Cornejo
Assessoria *ad hod* prestada: FAPESP e CNPq.
Referee dos seguintes journais internacionais: Journal of Magnetism and Magnetic Materials - JMMM, Physica B, Journal of Alloys and Compounds e Journal of Applied Physics.

Euzi Conceição Fernandes da Silva
Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.
Arbitragem para: Physical Review, Modern Physics Letters B, International Journal of Modern Physics B e Thin Solid Films.

Ewout Ter Haar
Assessoria *ad hoc* prestada: CNPq.

Gerardo Fabián Goya
Assessor *ad-hoc* da FAPESP, CNPq, FONCyT (Argentina), FUNCITEC (Fundação de Ciência e Tecnologia de Santa Catarina) e LNLS (Laboratório Nacional de Luz Síncrotron).
Referee dos seguintes Jornais Internacionais: Journal of Applied Physics, Physica B, Journal of Solid State Chemistry, Journal of Magnetism and Magnetic Materials - JMMM, Physica Statu Solidi, Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials, Brazilian Journal of Physics, Material Science Forum, Materials Letters, Materials Research Bulletin, Journal of Materials Science, Revista Mexicana de Física, Physical Review B e Physical Review Letters.

Guennadii Michailovich Gusev
Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.
Arbitragem para: Physical Review B, Physical Review Letters, Journal of Physics: Condensed Matter e Brazilian Journal of Physics.

Helena Maria Petrilli
Assessoria *ad hoc* prestada: ANPCyT (Argentina).
Arbitragem para: Hyperfine Interactions, Physica Status Solidi B, Physical Review B, Physical Review Letters, Journal of Non-Crystalline Solids e Brazilian Journal of Physics.

Hercílio Rodolfo Rechenberg
Assessoria *ad hoc* prestada: CNPq, CAPES, FAPESP, FAPEMIG e FAPDF.
Arbitragem para: Physical Review Letters, Physical Review B, Physica Status Solidi, Journal of Alloys e Compounds.

Lucy Vitória Credidio Assali
Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP e CNPq.

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

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, Semiconductor Science and Technology e Superlattices and Microstrutures.

Maria Cristina dos Santos
Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, CNPq e FAPEMIG.
Arbitragem para: Physical Review B, Physical Review Letters, Synthetic Metals, Journal of Molecular Structure. Theochem., Chemical Physics Letters e Solid State Communications.

Marília Junqueira Caldas
Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, CNPq e CAPES.
Arbitragem para: Physical Review B, Solid State Communications, Physical Review Letters, Journal of Chemical Physics, Journal of Physical Chemistry B, Physica Status Solidi c (Editorial Board) e Physica Status Solidi a & b.

Nei Fernandes de Oliveira Jr.
Assessoria *ad hoc* prestada: FAPESP, FINEP e CNPq.

Rafael Sá de Freitas
Arbitragem para: Physical Review B, Physical Review Letters, European Physical Journal B e Materials Letter.

Renato de Figueiredo Jardim
Assessoria *ad hoc* prestada a FACEPE, FAPESP,CAPES, FUNDUNESP, NSF (USA), CNPq.MCT, FINEP, ANPCYT (Argentina).
Arbitragem para: Applied Physics A, Applied Physics Letters, Brazilian Journal of Physics, Journal of Applied Physics, Journal of Macromolecular Science – Pure and Applied Chemistry, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Material Letters, Materials Research, Physica C, Physica Status Solidi (b), Physics Letters A, Physical Review B, Physical Review Letters e Solid State Communications.
Assessoria prestada ao Programa de Pós-Graduação em Química Fundamental IQ-USP.
Assessoria prestada à Câmara Curricular e do Vestibular Conselho de Graduação da USP.

Assessoria prestada ao Programa de Pós-Graduação em Ciências dos Materiais IFSC-São Carlos.
Assessoria prestada ao Programa de Pós-Graduação em Física IF Gleb Wataghin-UNICAMP, Campinas, SP.
Assessoria prestada ao Programa de Pós-Graduação em Física IFUSP.

Sylvio Roberto Accioly Canuto
Assessoria prestada: FAPESP, CNPq, CAPES, FAPEMIG, FACEPE, FAPDF, FAPERGS, FINEP e CONICYT (Uruguai)
Arbitragem para: International Journal of Quantum Chemistry, Chemical Physics Letters, Journal of Molecular Structure. Theochem, Physical Review A, Physical Review B, Physics Letters A, Brazilian Journal of Physics, Journal of Chemical Physics, Journal of Physical Chemistry A e B, Journal of the American Chemical Society, Journal of the Chemical Society (Perkins Transaction), Journal of the Brazilian Chemical Society, Computer Physics Communications, Química Nova, Revista Brasileira de Ensino de Física, Modern Physics Letters, Journal of Food and Agricultural Chemistry e Journal of Colloids.

Valdir Bindilatti
Assessoria prestada: FAPESP e CNPq.
Arbitragem para: Physical Review B e Physical Review Letters.

3.3 Cursos, Palestras, Mesas-Redondas, "Invited talks" e Outros:

Adalberto Fazzio
"Simulação Computacional em Materiais" - Colóquio, Instituto Nacional de Metrologia, Normalização e Qualidade Industrial/INMETRO, Rio de Janeiro, RJ (14 de fevereiro de 2006).

"A Física no Brasil e para o Brasil" - Palestra, Centro Universitário Franciscano - UNIFRA, Santa Maria, RS (12 de abril de 2006).

"Dispositivos Moleculares" - Palestra, Universidade Federal de Santa Maria, RS (17 de abril de 2006).

"Structural, Electronic and Transport Properties in Nanostructures" - Palestra Convidada, National Renewable Energy Laboratory - NREL, Golden, Colorado, Estados Unidos (13 de maio de 2006).

"Deus e o Diabo na Nanotecnologia" - Palestra, Física para Todos, Comissão de Cultura e Extensão do IFUSP, Universidade de São Paulo, Museu Paulista, São Paulo, SP (25 de maio de 2006).

“Transporte em Nanoestruturas” – Seminário, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG (04 de julho de 2006).

“Nanoeletrônica e Tecnologia de Displays” - Simpósio (Expositor), 58ª Reunião Anual da SBPC, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC (de 16 a 21 de julho de 2006).

“Curso de Física no Brasil” - Mesa-Redonda, Evento em Comemoração aos “30 Anos do Curso de Física” da Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, ES (08 de agosto de 2006).

“Os Desafios da Pós-Graduação em Física no Brasil” - Mesa-Redonda, Evento em Comemoração aos “30 Anos do Curso de Física” da Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, ES (08 de agosto de 2006).

“Pesquisa na Amazônia - Perspectivas e Estratégias”, Mesa-Redonda, X Encontro Nacional IFNOPAP, Universidade Federal do Pará, Belém, PA (16 de agosto de 2006).

“Nanotecnologia Hoje” - Seminário, X Encontro Nacional IFNOPAP, Universidade Federal do Pará, Belém, Pa (18 de agosto de 2006).

“Física e Inovação Tecnológica” - Mesa-Redonda, Jornadas de Física, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (05 de outubro de 2006).

“O Futuro da(o) Física(o) no Brasil” - Mesa-Redonda, II Semana de Física da Universidade Estadual de Santa Cruz, Ilhéus, BA (de 26 de outubro de 2006).

“História da Sociedade Brasileira de Física” - Palestra, II Semana de Física da Universidade Estadual de Santa Cruz, Ilhéus, BA (27 de outubro de 2006).

“Propriedades Eletrônicas, Magnéticas, Estruturais e de Transporte de Nanocoisas” - Palestra, I Encontro do Instituto do Milênio de Nanotecnologia, Rio de Janeiro, RJ (20 de novembro de 2006).

“Nanociência e Nanotecnologia” - Seminário, Universidade Federal Fluminense, Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda, Volta Redonda, RJ (28 de novembro de 2006).

“Transporte Eletrônico em Nanomateriais” - Seminário, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Física, Porto Alegre, RS (11 de dezembro de 2006).

André Bohomoletz Henriques

"Dicroísmo Circular em Calcógenos de Européio" - Seminário, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE, São José dos Campos, SP (11 de julho de 2006).

"Magnetic Circular Dichroism in EuTe in the Ferromagnetic Order" - Invited Talk, 17th International Conference on High Magnetics Fields in Semiconductor Physics (Seminag-17) Würzburg, Alemanha, (01 de agosto de 2006).

"Efeito do Campo Magnético sobre Espectro de Absorção" - Oficina, Jornadas de Física, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (de 04 a 06 de outubro de 2006).

Antônio Domingues dos Santos

"Filmes Finos e Magnetoótica" - Oficina, Jornadas de Física, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (de 04 a 06 de outubro de 2006).

Antônio José Roque da Silva

"Structural, Electronic and Transport Properties of Nanostructures" - Seminário, Center for Computational Materials, University of Texas at Austin, EUA (20 de março de 2006).

"Nanotecnologia e a Engenharia do Futuro" - Palestra, Universidade Presbiteriana Mackenzie, São Paulo, SP (28 de abril de 2006).

"Structural, Electronic and Transport Properties of Nanostructures" - Palestra Plenária, XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, São Lourenço, MG (11 de maio de 2006).

"Theoretical Studies of Defects in Crystalline and Amorphous HfO_2" - Invited Talk, European Materials Research Society (E-MRS) 2006 Spring Meeting, Nice, França (de 29 de maio a 02 de junho de 2006).

"Simulações Computacionais de Nanoestruturas" - Seminário, ITA, Departamento de Física, São José dos Campos, SP (14 de junho de 2006).

"Propriedades Eletrônicas, Estruturais e de Transporte de Nanoestruturas" - Seminário, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos, SP (15 de agosto de 2006).

"Adsorption and Conductance of BDT on the Au (111)" - Invited Talk, 10th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure, Foz do Iguaçú, PR (28 de agosto de 2006).

"Defects, Mechanical Properties, Reactivity and Charge Transport in Pristine and N-Doped Carbon Nanotube" - Seminário, Universidad Autônoma de Madrid, Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Madrid, Espanha (19 de setembro de 2006).

"Propriedades Eletrônicas, Estruturais e de Transporte de Nanoestruturas" - Palestra, Universidade Federal de São Carlos, Departamento de Física, São Carlos, SP (27 de setembro de 2006).

"O_2 and Spin Effects in SiO_2 and Point Defects in Ice" - Seminário, University of Cambridge, Reino Unido (23 de outubro de 2006).

"Nanotecnologia e a Engenharia do Futuro" - Palestra, Universidade Estadual Paulista, Instituto de Física Teórica, São Paulo, SP (29 de novembro de 2006).

"Density Functional Theory and Non-Equilibrium Greens Function for Transport Calculations" - Palestra Convidada, Workshop sobre Cálculos de Primeiro Princípio de Transporte em Nanoestruturas, Brasília, DF (de 11 a 16 de dezembro de 2006).

"Applications of DFT-NEGF" - Palestra Convidada, Workshop sobre Cálculos de Primeiro Princípio de Transporte em Nanoestruturas, Brasília, DF (de 11 a 16 de dezembro de 2006).

Carmen Silvia de Moya Partiti

"O Laboratório de Materiais Magnéticos" - Palestra, Evento A Universidade e as Profissões, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (16 de setembro de 2006).

"Characterization of Marine Sediments of Casqueiro River, São Paulo, Brazil, by Mössbauer Spectroscopy, PIXE and Magnetic Susceptibility: a Study of Environmental Magnetism" - Invited Talk, 10th Latin American Conference on the Application of Mössbauer Effect - LACAME 2006, Rio de Janeiro, RJ (06 de novembro de 2006).

Gerardo Fabián Goya

"Early Cancer Diagnosis and Therapies using Functionalised Superparamagnetic Nanoparticles" - Palestra Convidada, Summer School on Soft Matter Physics, CNPq-ICTP, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (fevereiro de 2006).

"Magnetic Structure and Power Absorption in Magnetite Nanoparticles from a MRI Contrast Agent" - Keynote Lecture, Euromech Colloquim on Magnetic Fluid Research, Dresden, Alemanha (de 27 de fevereiro a 1° de março de 2006).

"Experiments on Magnetic Nanoparticles: The Relevance of Magnetic Interactions and Anisotropy for Biomedical Applications" - Invited Talk, Materials Science & Technology 2006 Conference and Exhibition (MS&T06), Duke Energy Center, Cincinnati, Estados Unidos (de 16 a 20 de outubro de 2006).

"Magnetic Nanoparticles, Power Absorption & Magnetic Fluid Hyperthermia (MF)" - Invited Talk, Physics Department, INSA, Université Toulouse, França (19 de setembro de 2006).

Helena Maria Petrilli
"An Introduction to DFT Electronic Structure Calculations: Prototype Study of Poly-Paraphenylene" - Palestra Convidada, 5º Encontro do Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos - IMMP (Institutos do Milênio)", Atibaia/Nazaré Paulista, SP (9 a 13 de abril de 2006).

"Computer Simulations through Ab Initio Electronic Structure Calculations" - Palestra Convidada, V Encontro da Sociedade Brasileira de Pesquisa em Materiais - SBPMat, Florianópolis, Santa Catarina (08 a 12 de outubro de 2006).

Lucy Vitória Credidio Assali
"Propriedades de Materiais e Nanomateriais Semicondutores" - Seminário, Centro de Tecnologia Mecânica e Automação de Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Aveiro, Aveiro, Portugal (12 de setembro de 2006).

Maria Cristina dos Santos
"Eletrônica Molecular" - Curso de Verão 2006, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (08 e 10 de fevereiro de 2006).

"Procurando Materiais Superduros e encontrando Heterofulerenos" - Colóquio, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (06 de abril de 2006).

"Estudo Teórico sobre Materiais Superduros" - Palestra, Instituto de Física Teórica da Universidade Estadual Paulista, São Paulo, SP (14 de junho de 2006).

"Métodos Teóricos em Física Molecular para Caracterização de Materiais" - Mini-Curso, X Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, Niterói RJ (12 a 14 de julho de 2006).

"Simulações Atomísticas de Materiais como Ferramenta de Descobertas" - Seminário, Pós-Graduação, Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP (08 de novembro de 2006).

Marília Junqueira Caldas
"Polímeros Orgânicos Semicondutores: Morfologia de Filmes e Interfaces" - Seminários, Summer School on Soft-Matter Physics, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (21 de fevereiro de 2006).

"Tuning of Si Surfaces by Organic Monolayers: a View from Theory" - Invited Talk, 3rd National Conference on Nanoscience and Nanotechnology", Trieste, Itália (22 de maio de 2006).

"Trimming and Taming Silicon Surfaces: a First-Principles Study" - Invited Talk, 28th International Conference on the Physics of Semiconductors, Vienna, Austria (24 a 28 de julho de 2006).

Rafael Sá de Freitas
"Gelos de Spins Naturais e Artificiais" - Colóquio, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (19 de outubro de 2006).

Renato de Figueiredo Jardim
"Nature of the Magnetic Phase Transition in $La_{0.7}Ca_{0.3}MnO_3$" - Seminário, Comisión Nacional de Energía Atómica, CNEA, Buenos Aires, Argentina (setembro de 2006).

"Phase Separation, Current Localization and Joule Self-Heating Effects in Cr-doped $Nd_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$" - Seminário, Universidade de La Plata, Departamento de Química, CEQUINOR, La Plata, Argentina (setembro de 2006).

"Supercondutividade em Metais e Óxidos" - Seminário, Evento "A Física no Século XX", Universidade Estadual Paulista, Instituto de Física Teórica (22 de novembro de 2006).

Sylvio Roberto Accioly Canuto
"Forças Intermoleculares e Processos em Solução"- Mini-Curso, Universidade Federal da Bahia, Instituto de Física, Departamento de Física do Estado Sólido, Salvador, BA (janeiro de 2006).

"Spectroscopy of Atoms and Molecules in Liquid Environment. Sequential Monte Carlo Quantum Mechanics Studies" - Invited Talk, 4th International Meeting on Photodynamics, Havana, Cuba (de 06 a 10 de fevereiro de 2006).

"Solute-Solvent Hydrogen Bonds and Their Influence on Molecular Properties in Explicit Liquid Environment" - Invited Talk, III International Conference on Hydrogen Bonding and Molecular Internactions, Kiev, Ucrânia (17 de maio de 2006).

"Combined Monte Carlo - Quantum Mechanics Approach to Study Molecular Properties in Liquid Systems" - Invited Talk, Workshop Mathematics in Chemistry, Universidade de Lisboa, Lisboa, Portugal (21 de julho de 2006).

"Mistérios da Água" - Palestra, Física para Todos, Comissão de Cultura e Extensão do IFUSP, Universidade de São Paulo, Estação Ciência, São Paulo, SP (05 de agosto de 2006).

"Mistérios da Água" - Palestra, Física para Todos, Comissão de Cultura e Extensão do IFUSP, Universidade de São Paulo, Museu Paulista, São Paulo, SP (17 de agosto de 2006).

"Mistérios da Água" - Palestra, Física para Todos, Comissão de Cultura e Extensão do IFUSP, Centro Cultural, São Paulo, SP (07 de outubro de 2006).

"Água, um Líquido Comum e Anômalo" - Colóquio, Convite à Física 2006, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (18 de outubro de 2006).

"Molecular Polarization in Liquid Environment" - Invited Talk, International Conference of Computational Methods in Science and Engineering 2006 (ICCMSE 2006), Chania, Ilha de Creta, Grécia (de 27 de outubro a 1º de novembro de 2006).

Valdir Bindilatti
"Trabalhando com Baixíssimas Temperaturas" - Oficina, Jornadas de Física, Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, SP (de 04 a 06 de outubro de 2006).

3.4 Participação de Docentes em Concursos no IFUSP como Candidatos:

CONCURSO PÚBLICO PARA O PROVIMENTO DE UM CARGO DE PROFESSOR TITULAR, REF. MS-6, EM RDIDP, JUNTO AO DEPARTAMENTO DE FÍSICA DOS MATERIAIS E MECÂNICA (Edital IF 017/2005)

Candidatos:
1. Profa. Dra. Maria Cecília Barbosa da Silveira Salvadori (DFAP)
2. Prof. Dr. Guennadii Michailovich Gusev
3. Prof. Dr. André Bohomoletz Henriques

Candidato indicado:
2. Prof. Dr. Guennadii Michailovich Gusev

Período: de 08 a 09.06.2006
Homologação: 29.06.2006

Disciplina:
Introdução à Física do Estado Sólido I (FMT5814)

Banca:
Hercílio Rodolfo Rechenberg (Presidente) (IFUSP)
Fernando Alvarez (IFGW-UNICAMP)
Fernando Cerdeira (IFGW-UNICAMP)
Fernando Cláudio Zawislak (IF-UFRGS)
Oscar Nassif de Mesquita (DF-UFMG)

3.5 Participação em Comissões Julgadoras no IFUSP:

Adalberto Fazzio
Frederico Dutilh Novaes (Tese de Doutorado).
Título da Tese: "Nanoestruturas: Propriedades Estruturais, Eletrônicas e de Transporte de Carga".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (Orientador) (DFMT-IFUSP), Andréa Brito Latgé (IF-UFF), Roberto Hiroki Miwa (DF-UFU), Sylvio Roberto Accioly Canuto (DFMT-IFUSP) e Varlei Rodrigues (IFGW-UNICAMP).
Data: 26 de maio de 2006.

Lucas Viani (Dissertação de Mestrado).
Título de Dissertação: "Estudo Ab Initio de Fulerenos Menores e C_{60} e seus Derivados para Aplicações em Eletrônica Molecular".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (DFMT-IFUSP), Fernando Alvarez (IFGW-UNICAMP) e Maria Cristina dos Santos (Orientadora) (DFMT-IFUSP).
Data: 16 de novembro de 2006.

Antônio Domingues dos Santos
Celso de Araújo Duarte (Tese de Doutorado).
Título da Tese: "Propriedades Magnéticas e de Spin em Semicondutores do Grupo III-V".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Domingues dos Santos (DFMT-IFUSP), Guennadii Michailovich Gusev (Orientador) (DFMT-IFUSP), Iouri Poussep (IFSC-USP), Ivan Costa da Cunha Lima (IF-UERJ) e José Brás Barreto de Oliveira (UNESP-Bauru).
Data: 19 de junho de 2006.

Thiago Nascimento Nogueira (Tese de Doutorado).
Título da Tese: “Estudo Experimental de Caos Quântico com Ressonadores Acústicos”.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Alfredo Gontijo de Oliveira (DF-UFMG), Antônio Domingues dos Santos (DFMT-IFUSP), José Carlos Sartorelli (Orientador) (IFUSP), Maria Carolina Nemes (UFMG) e Paulo Batista Gonçalves (PUC-RJ).
Data: 14 de dezembro de 2006.

Antônio José Roque da Silva
Ivana Zanella da Silva (Tese de Doutorado).
Título da Tese: “Propriedades Estruturais e Eletrônicas de Heterofulerenos em Superfícies”.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antonio José Roque da Silva (Orientador) (DFMT-IFUSP), Fernando Lazáro Freire Jr. (PUC-RJ), Helena Maria Petrilli (DFMT-IFUSP), MaurÍcio Veloso Brandt Pinheiro (DF-UFMG) e Ronaldo Mota (DF-UFSM).
Data: 28 de junho de 2006.

Herbert de Castro Georg (Tese de Doutorado).
Título da Tese: “"Efeitos do Meio em Propriedades Conformacionais e Eletrônicas de Moléculas”.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Carlos Borin (IQUSP), Antônio José Roque da Silva (DFMT-IFUSP), Kaline Rabelo Coutinho (Orientadora) (DFGE-IFUSP), Mario José de Oliveira (DFGE-IFUSP) e Rogério Custódio (IQ-UNICAMP).
Data: 10 de julho de 2006.

Luana Sucupira Pedroza (Dissertação de Mestrado).
Título de Dissertação: “Método de Monte Carlo utilizando Cálculos de Energia Total Ab Initio”.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antonio José Roque da Silva (Orientador) (DFMT-IFUSP), Maria Cristina dos Santos (DFMT-IFUSP) e Rodrigo Barbosa Capaz (IF-UFRJ).
Data: 24 de agosto de 2006.

Mauro Fernando Soares Ribeiro Junior (Dissertação de Mestrado).
Título de Dissertação: “Estudos dos Compostos Semicondutores de Metais de Transição - Grupo V para Aplicação em Spintrônica”.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio José Roque da Silva (DFMT-IFUSP), Antônio Yukio Ueta (INPE) e Luiz Guimarães Ferreira (Orientador) (DFMT-IFUSP).
Data: 07 de dezembro de 2006.

Armando Corbani Ferraz
Sandro Inácio de Souza (Dissertação de Mestrado).

Título da Dissertação: “Estudo da Adsorção da Molécula de H_2S sobre a Superfície InP(001)”.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Armando Corbani Ferraz (Orientador) (DFMT-IFUSP), Lucy Vitória Credidio Assali (DFMT-IFUSP) e Ronei Miotto (IF-UnB).
Data: 06 de março de 2006.

Carlos Castilla Becerra
Zulmara Virgínia de Carvalho (Tese de Doutorado).
Título da Tese: “Magnetização Remanente em Sistemas Antiferromagnéticos”.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Artur da Silva Carriço (DF-UFRN), Carlos Castilla Becerra (Orientador) (DFMT-IFUSP), Frederico C. Montenegro (UFPE), Mário José de Oliveira (DFGE-IFUSP) e Renato de Figueiredo Jardim (DFMT-IFUSP).
Data: 17 de março de 2006.

Daniel Reinaldo Cornejo
Manuel Alfredo Espinoza Sanchez (Tese de Doutorado).
Título da Tese: “Síntese e Caracterização de Filmes de Fosfato de Lítio e Ferro”.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Celso Valentim Santilli (UNESP-Araraquara), Daniel Reinaldo Cornejo (DFMT-IFUSP), Márcia Carvalho de Abreu Fantini (Orientadora) (DFAP-IFUSP), Paulo Atsushi Suzuki (FAENQUIL-Lorena) e Suhaila Maluf Shibli (DFEP-IFUSP).
Data: 20 de março de 2006.

Guennadii Michailovich Gusev
Celso de Araújo Duarte (Tese de Doutorado).
Título da Tese: “Propriedades Magnéticas e de Spin em Semicondutores do Grupo III-V”.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Domingues dos Santos (DFMT-IFUSP), Guennadii Michailovich Gusev (Orientador) (DFMT-IFUSP), Iouri Poussep (IFSC-USP), Ivan Costa da Cunha Lima (IF-UERJ) e José Brás Barreto de Oliveira (UNESP-Bauru).
Data: 19 de junho de 2006.

Helena Maria Petrilli
Ivana Zanella da Silva (Tese de Doutorado).
Título da Tese: “Propriedades Estruturais e Eletrônicas de Heterofulerenos em Superfícies”.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antonio José Roque da Silva (Orientador) (DFMT-IFUSP), Fernando Lazáro Freire Jr. (PUC-RJ), Helena Maria Petrilli (DFMT-IFUSP), MaurÍcio Veloso Brandt Pinheiro (DF-UFMG) e Ronaldo Mota (DF-UFSM).
Data: 28 de junho de 2006.

Marcos Brown Gonçalves (Dissertação de Mestrado).
Título da Dissertação: “Efeitos de Estado Sólido e Ligações de Hidrogênio sobre o Gradiente de Campo Elétrico no Núcleo no Imidazol”.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Douglas Soares Galvão (IFGW-UNICAMP), Helena Maria Petrilli (Orientadora) (DFMT-IFUSP) e Lucy Vitória Credidio Assali (DFMT-IFUSP).
Data: 17 de outubro de 2006.

Rafael Carvalho Barreto (Dissertação de Mestrado).
Título da Dissertação: “Propriedades Eletrônicas de Líquidos Homogêneos”.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antonio Carlos Borin (IQUSP), Helena Maria Petrilli (DFMT-IFUSP) e Sylvio Roberto Accyoli Canuto (Orientador) (DFMT-IFUSP).
Data: 14 de novembro de 2006.

Edwin Hobi Júnior (Exame de Qualificação de Doutorado)
Projeto: “Estudo Teórico da Evolução Dinâmica de Nanofios de Ouro puros e com Impurezas”.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Alex Antonelli (IFGW-UNICAMP), Helena Maria Petrilli (DFMT-IFUSP) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (DFMT-IFUSP).
Data: 08 de agosto de 2006

Hercílio Rodolfo Rechenberg
Concurso Público de Provas e Títulos para o provimento de um Cargo de Professor Titular, Ref. MS-6, em RDIDP, junto ao Departamento de Física dos Materiais e Mecânica (Edital AAA/IF/017/2005).
Inscritos: Profs. Drs. Maria Cecília Barbosa da Silveira Salvadori, Guennadii Michailovich Gusev e André Bohomoletz Henriques.
Indicado: Prof. Dr. Guennadii Michailovich Gusev.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Hercílio Rodolfo Rechenberg (Presidente) (DFMT-IFUSP), Fernando Alvarez (IFGW-UNICAMP), Fernando Cerdeira (IFGW-UNICAMP), Fernando Cláudio Zawislak (IF-UFRGS) e Oscar Nassif de Mesquita (DF-UFMG).
Período: de 08 a 09 de junho de 2006.

Lucy Vitória Credidio Assali
Processo Seletivo para a Contratação de um Docente na Categoria de auxiliar de Ensino, MS-1, em RTC, junto ao Departamento de Física Experimental (Edital AAA/IF/001/2006).
Inscritos: Drs. Adilson Camilo de Barros, Marlete Pereira Meira de Assunção, Zwinglio de Oliveira Guimarães Filho, José Carlos Orsi Morel, Fernando Teixeira da Silva Filho, Joel Mesa Hormaza, Celso de Camargo Barros Júnior e Carla da Costa Guimarães.
Indicado: José Kenichi Mizukoshi.

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Lucy Vitória Credidio Assali (DFMT-IFUSP), Marcelo Gameiro Munhoz (DFNC-IFUSP) e Nelson Fiedler Ferrara Júnior (Presidente) (DFGE-IFUSP).
Período: de 17 a 19 de janeiro de 2006.

Sandro Inácio de Souza (Dissertação de Mestrado).
Título da Dissertação: "Estudo da Adsorção da Molécula de H_2S sobre a Superfície InP(001)".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Armando Corbani Ferraz (Orientador) (DFMT-IFUSP), Lucy Vitória Credidio Assali (DFMT-IFUSP) e Ronei Miotto (IF-UnB).
Data: 06 de março de 2006.

Thaciana Valentina Malaspina Fileti (Tese de Doutorado).
Título da Tese: "Estabilidade Isomérica e Ligações de Hidrogênio em agregados e líquidos moleculares".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Francisco Bolívar Correto Machado (ITA), João Bosco Paraíso da Silva (DF-UFPE), Lucy Vitória Credidio Assali (DFMT-IFUSP), Roberto Rivelino de Melo Moreno (UFBA) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (Orientador) (DFMT-IFUSP).
Data: 09 de agosto de 2006.

Marcos Brown Gonçalves (Dissertação de Mestrado).
Título da Dissertação: "Efeitos de Estado Sólido e Ligações de Hidrogênio sobre o Gradiente de Campo Elétrico no Núcleo no Imidazol".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Douglas Soares Galvão (IFGW-UNICAMP), Helena Maria Petrilli (Orientadora) (DFMT-IFUSP) e Lucy Vitória Credidio Assali (DFMT-IFUSP).
Data: 17 de outubro de 2006.

Maria Cristina dos Santos
Luana Sucupira Pedroza (Dissertação de Mestrado).
Título de Dissertação: "Método de Monte Carlo utilizando Cálculos de Energia Total Ab Initio".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antonio José Roque da Silva (Orientador) (DFMT-IFUSP), Maria Cristina dos Santos (DFMT-IFUSP) e Rodrigo Barbosa Capaz (IF-UFRJ).
Data: 24 de agosto de 2006.

Lucas Viani (Dissertação de Mestrado).
Título de Dissertação: "Estudo Ab Initio de Fulerenos Menores e C_{60} e seus Derivados para Aplicações em Eletrônica Molecular".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (DFMT-IFUSP), Fernando Alvarez (IFGW-UNICAMP) e Maria Cristina dos Santos (Orientadora) (DFMT-IFUSP).
Data: 16 de novembro de 2006.

Marília Junqueira Caldas
Marcelo Maia Garcia (Dissertação de Mestrado).
Título da Dissertação: "Modelos para o Transporte Eletrônico em Filmes Orgânicos Desordenados".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Francisco Eduardo Gontijo Guimarães (IFSC-USP), Marília Junqueira Caldas (Orientadora) (DFMT-IFUSP) e Mario José de Oliveira (DFGE-IFUSP).
Data: 15 de maio de 2006.

Renato de Figueiredo Jardim
José Antonio Souza (Tese de Doutorado).
Título da Tese: "Estudo das Propriedades Termodinâmicas e Eletrônicas em Manganitas".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Renato de Figueiredo Jardim (Orientador) (DFMT-IFUSP), Carlos Rettori (IFGW-UNICAMP), Eduardo Granado Monteiro da Silva (IFGW-UNICAMP), Fernando Luis Araújo Machado (DF-UFPE) e Luis Ghivelder (IF-UFRJ).
Data: 15 de março de 2006.

Zulmara Virgínia de Carvalho (Tese de Doutorado).
Título da Tese: "Magnetização Remanente em Sistemas Antiferromagnéticos".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Artur da Silva Carriço (DF-UFRN), Carlos Castilla Becerra (Orientador) (DFMT-IFUSP), Frederico C. Montenegro (UFPE), Mário José de Oliveira (DFGE-IFUSP) e Renato de Figueiredo Jardim (DFMT-IFUSP).
Data: 17 de março de 2006.

Sylvio Roberto Accioly Canuto
Frederico Dutilh Novaes (Tese de Doutorado).
Título da Tese: "Nanoestruturas: Propriedades Estruturais, Eletrônicas e de Transporte de Carga".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (Orientador) (DFMT-IFUSP), Andréa Brito Latgé (IF-UFF), Roberto Hiroki Miwa (DF-UFU), Sylvio Roberto Accioly Canuto (DFMT-IFUSP) e Varlei Rodrigues (IFGW-UNICAMP).
Data: 26 de maio de 2006.

Thaciana Valentina Malaspina Fileti (Tese de Doutorado).
Título da Tese: "Estabilidade Isomérica e Ligações de Hidrogênio em agregados e líquidos moleculares".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Francisco Bolívar Correto Machado (ITA), João Bosco Paraíso da Silva (DF-UFPE), Lucy Vitória Credidio Assali (DFMT-IFUSP), Roberto Rivelino de Melo Moreno (UFBA) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (Orientador) (DFMT-IFUSP).
Data: 09 de agosto de 2006.

Rafael Carvalho Barreto (Dissertação de Mestrado).
Título da Dissertação: "Propriedades Eletrônicas de Líquidos Homogêneos".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antonio Carlos Borin (IQUSP), Helena Maria Petrilli (DFMT-IFUSP) e Sylvio Roberto Accyoli Canuto (Orientador) (DFMT-IFUSP).
Data: 14 de novembro de 2006.

3.6 Participação em Comissões Julgadoras em Outras Instituições:

Adalberto Fazzio
Concurso Público de Títulos e Provas para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor, em RDIDP, Ref. MS-3, junto ao Departamento de Física e Informática do Instituto de Física de São Carlos/USP, São Carlos, SP.
Área de conhecimento: Física Computacional de Alto Desempenho: Simulações de Monte Carlo ou Dinâmica Molecular, Edital ATAc-71/2005 de 14.12.2005.
Inscritos: Drs. Luiz Vitor de Souza Filho, Paulo Sérgio Branício, Ronaldo Giro, Tereza Cristina da Rocha Mendes, Túlio Eduardo Rodrigues e Vitor Rafael Coluci.
Indicada: Tereza Cristina da Rocha Mendes.
Comissão Julgadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), Francisco Castilho Alcaraz (IFSC/USP), Hélio Chacham (DF-UFMG), José Fernando Fontanari (IFSC/USP) e Nestor Felipe Caticha Alfonso (IFUSP).
Período: de 22 a 25 de mai de 2006.

Concurso Público para Magistério Superior, junto ao Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense, Niterói, RJ.
Inscritos: 19.
Indicada: Dra. Stéphane Serge Yves Jérôme Soriano.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (Presidente) (IFUSP), Jürgen Stilck (IF-UFF), Marina Nielsen (IFUSP) e Paulo Roberto Gomes (IF-UFF).
Período: de 12 a 14 de junho de 2006.

Pablo Edilberto Munayco Solorzano (Tese de Doutorado - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, RJ).
Título da Tese: "Nanopartículas de Fé em Filmes de Metais não Magnéticos Ag, Cd, Zn".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (IFUSP), Alberto Passos Guimarães Filho (CBPF), Elisa Maria Baggio Saitovich (Presidente) (CBPF), Fred Jochen Litterst (Convidado Especial) Univ. Tecn. Braunschweig - Alemanha), Lívio Amaral (IF-UFRGS) e Rubem Luis Sommer (CBPF).

Data: 14 de agosto de 2006.

Concurso para o Provimento de um Cargo de Professor Assistente, junto à Pontifícia Universidade Católica, Rio de Janeiro, RJ.
Candidatos Selecionados para a segunda fase do concurso: Drs. Alexandre Dias Ribeiro, Ana Luíza Cardoso Pereira, Célia Beatriz Anteneodo de Porto, Felipe Arruda de Araújo Pinheiro, Sílvio Manuel Duarte Queirós e Tatiana G. Rappoport.
Indicada: Célia Beatriz Anteneodo de Porto.
Comissão Julgadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (Presidente) (IFUSP), Antônio Ferreira da Silva (IF-UFBa), Mário José de Oliveira (IFUSP) e Rita Maria Cunha de Almeida (IF-UFRGS).
Período: de 08 a 09 de novembro de 2006.

Concurso de Provas e Títulos para Professor do Magistério Superior na Classe de Professor Titular, na área de Física Geral, de acordo com o Edital no 005/2006-PRH de 04.04.2006, junto ao Centro de Ciências Exatas e da Terra da Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, RN.
Inscritos: Profs. Drs. Artur da Silva Carriço, José Renan de Medeiros, Luciano Rodrigues da Silva e Walter Eugênio de Medeiros.
Indicado: José Renan de Medeiros.
Comissão Julgadora: Profs. Drs. Adalberto Fazzio (Presidente) (IFUSP), Igor Ivory Gil Paca (IAGUSP), Márcia Ernesto (IAGUSP), Múcio Amado Continentino (IF-UFF-RJ) e Walter Junqueira Maciel (IAGUSP).
Período: de 06 a 08 de dezembro de 2006.

Antônio Domingues dos Santos
Alexsandro Silvestre da Rocha (Tese de Doutorado - Departamento de Física da Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC).
Título da Tese: “Magnetotransporte em Sistemas Nanoestruturados de Co/Cu”.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adilson Jesus Aparecido de Oliveira (DF-UFSCar), Antônio Domingues dos Santos, Françoise Toledo Reis (DF-UFSC), Maria Luísa Sartorelli (Presidente) (DF-UFSC), Osvaldo Frederico Schilling Neto (DF-UFSC) e Paulo Cesar Tettmanzy D’Ajello (DF-UFSC).
Data: 1º de novembro de 2006.

Antônio José Roque da Silva
Edgard Pacheco Moreira de Amorim (Dissertação de Mestrado - Instituto de Física “Gleb Wataghin” da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP).
Título da Dissertação: “Estudo da Evolução Dinâmica de Nanofios de Cobre e Ouro”.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio José Roque da Silva (IFUSP), Edison Zacarias da Silva (Orientador) (IFGW-UNICAMP) e Varlei Rodrigues (IFGW-UNICAMP).
Data: 24 de março de 2006.

Ricardo Kagimura (Tese de Doutorado - Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG).
Título da Tese: "Estudo de Nanoestruturas Iônicas e Semicondutoras por Métodos de Primeiros Princícios".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Alex Antonelli (IFGW-UNICAMP), Antônio José Roque da Silva (IFUSP), Hélio Chacham (DF-UFMG), Mário Sérgio de Carvalho Mazzoni (DF-UFMG) e Roberto Luiz Moreira (DF-UFMG).
Data: 28 de março de 2006.

Eliane Marques de Oliveira (Dissertação de Mestrado - Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP).
Título da Dissertação: "Excitações Vibracionais Mediadas pela Ressonância de Feshbach Eletrônica $^2\Sigma_g^+$ no Espalhamento de Elétrons por Moléculas de H_2".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio José Roque da Silva (IFUSP), Marco Aurélio Pinheiro Lima (Orientador) (IFGW-UNICAMP) e Márcio José Menon (IFGW-UNICAMP),
Data: 31 de março de 2006.

Concurso Público para o Provimento de um Cargo de Professor Adjunto, junto à Escola de Engenharia Industrial e Metalúrgica de Volta Redonda, Centro Tecnológico da Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, RJ.
Área de conhecimento: Física da Matéria Condensada.
Inscritos: Drs. Ângelo Márcio de Souza Gomes, Antonio Tavares da Costa Júnior, Aquino Lauri de Espíndola, Dalber Rubén Sánchez Candela, Emmanuel Marcel Favre-Nicolin, Isaías Gonzaga de Oliveira, João José dos Santos Alves, José Augusto Oliveira Huguenin, Ladário da Silva, Leonardo Mondaini, Marcelo Silva Sarandy, Mauro Santos Ferreira, Mônica de Mesquita Lacerda e Stéphane Serge Yves Jérôme Soriano.
Indicado: Marcelo Silva Sarandy.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Amós Troper (CBPF-RJ), Antônio José Roque da Silva (IFUSP), João Carlos Fernandes (IF-UFF), Nivaldo Agostinho Lemos (IF-UFF) e Tobias Frederico (DF-ITA).
Período: de 05 a 07 de junho de 2006.

Kerson Rocha Júnior (Tese de Doutorado - Instituto de Física de São Carlos/USP, São Carlos, SP).
Título da Tese: "Tamanho da Nuvem Kondo".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio José Roque da Silva (IFUSP), Eduardo Miranda (IFGW-UNICAMP), Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior (IFSC/USP), Luiz Eduarco Moreira Carvalho de Oliveira (IF-UNICAMP) e Luiz Nunes de Oliveira (IFSC/USP).
Data: 23 de junho de 2006.

Banca Examinadora de Concurso Público para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor, em RTP, na área de Física Interdisciplinar,

especialidade em Física de Superfícies, junto ao Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.
Inscritos: Sérgio Brito Mendes, Abner de Siervo e João Alberto Mesquita Pereira.
Indicado: Abner de Siervo.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio José Roque da Silva (IFUSP), Daniel Mario Ugarte, Fernando Lázaro Freire Júnior (PUC-RJ), Martin Schmal (UFRJ) e Omar Teschke (Presidente) (IFGW-UNICAMP).
Período: 07 a 09 de agosto de 2006.

Ronaldo Júnio Campos Batista (Tese de Doutorado - Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG).
Título da Tese: "Nanopartículas e Junções Moleculares por Primeiros Princípios".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio José Roque da Silva (IFUSP), Hélio Chacham (Orientador) (DF-ICEx-UFMG), José Francisco de Sampaio (DF-ICEx-UFMG), Ricardo Wagner Nunes Física (DF-ICEx-UFMG) e Rodrigo Barbosa Capaz (IF-UFRJ).
Data: 28 de novembro de 2006.

Carmen Silvia de Moya Partiti
Fábio Jesus Moreira de Almeida (Dissertação de Mestrado - Ciências Físicas Aplicadas - IPEN - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo, SP).
Título da Dissertação: "Preparação de Vidros Fosfatos por meio do Aquecimento em Fornos de Microondas".
Comissão Examinadora: Prof. Dr. Carmen Silvia de Moya Partiti (IFUSP), José Roberto Martinelli (Orientador) (IPEN) e Sônia Lícia Baldochi (IPEN).
Data: 28 de setembro de 2006.

Daniel Reinaldo Cornejo
Ramom Alves Torquato (Dissertação de Mestrado - Departamento de Engenharia de Materiais da Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, PB).
Título da Dissertação: "Sinterização, Microestrutura e Propriedade Magnética de Ferritas Ni-Cu-Zn".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Ana Cristina Figueiredo de Melo Costa (Orientadora) (UAEMa-UFCG), Daniel Reinaldo Cornejo (IFUSP), Hélio Lucena Lira (UAEMa-UFCG), João Bosco Lucena de Oliveira (DQ-UFPB) e Lucianna da Gama Fernandes Vieira (UAEMa/UFCG).
Data: 27 de março de 2006.

Chan Chao Xin (Dissertação de Mestrado - Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP).
Título da Dissertação: "Síntese e Caracterização de Ferritas Mn-Zn via Reação de Combustão".

Comissão Examinadora: Profs. Drs. Daniel Reinaldo Cornejo (IFUSP), Márcio Raymundo Morelli (UFSCar) e Ruth Herta Goldschmidt Alliaga Kiminami (Orientadora) (UFSCar).
Data: 09 de junho de 2006.

Guennadii Michailovich Gusev
Marcel Nogueira D'Eurydice (Dissertação de Mestrado - Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP).
Título da Dissertação: "Estrutura de Bandas de Valência em Poços Quânticos e Super-Rede de Nitretos na Fase Hexagonal".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Guilherme Matos Sipahi (Orientador) (IFSC/USP), Guennadii Michailovich Gusev e Lara Küh Teles (ITA).
Data: 28 de abril de 2006.

Helena Maria Petrilli
Flávia Pirola Rosselli (Tese de Doutorado - Instituto de Química de São Carlos/USP, São Carlos, SP).
Título da Tese: "Nova Abordagem Matemática para o Cálculo da Descontinuidade do Potencial de Troca e Correlação de Kohn-Sham e sua Aplicação para Sistemas Atômicos e Moleculares (fragmentos de Poliacetilenos)".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Albérico Borges Ferreira da Silva (Orientador) (IQSC/USP), Helena Maria Petrilli (IFUSP), Klaus Werner Capelle (IFSC/USP), Nelson Henrique Morgon, Sérgio Emanuel Galembeck e Valter Luiz Libero (IFSC/USP).
Data: 23 de fevereiro de 2006.

Hercílio Rodolfo Rechenberg
André Luís Lapolli (Tese de Doutorado - IPEN - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo, SP).
Título da Tese: "Estudo de Interações Hiperfinas em Compostos Intermetálicos Gd(Ni,Pd,Cu)In, Tb(Ni,Pd)In e Ho(Ni,Pd)In".
Comissão Examinadora: Prof. Dr. Artur Wilson Carbonari (Orientador) (IPEN), Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP), José Mestnik Filho (IPEN), Luis Filipe C.P. de Lima (IPEN) e Rajendra Narain Saxena (IPEN).
Data: 07 de fevereiro de 2006.

Concurso Público de Provas e Títulos para o Provimento de um Cargo de Professor Titular, junto à Universidade Estatual Paulista, Campus de Bauru, Bauru, SP.
Inscritos: Profs. Drs. Carlos Frederico de Oliveira Graeff, Sérgio Gama.
Indicado: Prof. Dr. Carlos Frederico de Oliveira Graeff.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Elson Longo (IQ-UNESP), Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP), Herman J. Voorwald (FEG-UNESP), José Alberto Giacometti (FCT-UNESP) e Wido H. Schreiner (DF-UFPR).
Período: de 22 a 23 de maio de 2006.

Samuel Rodrigues de Oliveira Neto (Exame de Qualificação de Doutorado - Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS).
Título da Tese: "Propriedades Estruturais e Magnéticas de Compostos Tetragonais e Ortorrômbicos do Tipo (Fe,M) (Nb,Ta)206, onde M é um Metal de Transição 3d".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Gerardo Guido Martinez Pino (IF-UFRGS), Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP), João Batista Marimon da Cunha (Presidente) (IF-UFRGS) e Sérgio Ribeiro Teixeira (IF-UFRGS).
Data: 11 de setembro de 2006.

Avaliação de Memorial para a promoção ao nível de Professor Titular da Carreira Docente, junto ao Centro Universitáriio da FEI.
Candidato: Prof. Dr. Vagner Bernal Barbeta.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Francisco Ambrózio Filho (Presidente) (FEI), Francisco Enéas Cunha Lemos (FEI), Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP), Marcio Rillo (FEI) e Nei Fernandes de Oliveira Jr. (IFUSP).
Data: 03 de dezembro de 2006.

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro
Fabrício Macedo de Souza (Tese de Mestrado - Instituto de Física de São Carlos - IFSC-USP, São Carlos, SP).
Título: "Cálculo de Propriedades Eletrônicas de Heteroestruturas Semicondutoras Quase Zero-Dimensionais (Quantum dots)".
Comissão Examinadora: Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi (IFSC/USP), Prof. Dr. Klaus Werner Capelle (IFSC/USP), Profa. Dra. Luísa Maria Ribeiro Scolfaro (IFUSP).
Data: 28 de junho de 2006.

Maria Cristina dos Santos
Concurso para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor, junto ao Departamento de Engenharia de Sistemas Eletrônico, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, SP.
Especialidade: Modelagem de Novos Materiais e Dispositivos Semicondutores.
Inscrito: Prof. Dr. João Francisco Justo Filho.
Indicado.
Comissão Julgadora: Profs. Drs. Edison Zacarias da Silva (IFGW-UNICAMP), Francisco Javier Ramirez Fernandez (EPUSP), Hélio Chacham (DF-UFMG), Maria Cristina dos Santos (IFUSP) e Vitor Heloiz Nascimento (EPUSP).
Período: de 02 a 03 de fevereiro de 2006.

Marília Junqueira Caldas
Concurso de Professor Adjunto I, junto à Universidade Federal de São Paulo -UNIFESP, Campus Diadema, Diadema, SP.
Área de conhecimento: Ciências Físicas e Matemáticas.
Inscritos: Abel Dionizio Azeredo, Ademilson Zanandrea, Ailton Cavalli, Alexandre Colato, Alexandre Grezzi de Miranda Schmidt, Aline Duarte Lúcio,

Américo Sheitiro Tabata, Antônio Justino Ruas Madureira, Astrogildo de Carvalho Junqueira, Carlos Roberto Benatti, Daniel Zanetti de Florio, Douglas Casagrande, Eduardo Guéron, Eudes Eterno Fileti, Fernando Celso Perin Bertoni, Francisco Eugênio Mendonça da Silveira, Ilma Aparecida Marques Silva, Ji Il Kim, José Carlos Merino Mombach, José Kenichi Mizukoshi, Leonardo Paulo Maia, Lilia Coronato Courrol, Lourval dos Santos Silva, Luciene Lara, Lúcio Campos Costa, Luiz de Souza Filho Souza, Manuel Henrique Lente, Marcelo Camargo de Juli, Márcia Regina Dias Rodrigues, Márcio Henrique de Avelar Gomes, Marlete Pereira Meira de Assunção, Milton Silva da Rocha, Pedro Holanda, Renata Nascimento Nogueira, Roberto Menezes Serra, Rozane de Fátima Turchiello, Sandro Guedes de Oliveira, Sergio Leonardo Gómez, Sergio Rodrigues, Walter José da Costa Neves.

Indicados: Ji Il Kim, Lilia Coronato Courrol, Alexandre Grezzi de Miranda Schmidt, Marlete Pereira Meira de Assunção e Sandro Guedes de Oliveira.

Comissão Julgadora: Profs. Drs. Alinka Lépine (IFUSP), Carlos Frederico de Oliveira Graeff Luse (FFCLRP), Carlos Lenz César (IFGW-UNICMAP), Flávio Soares Correa da Silva (IMEUSP), Marília Junqueira Caldas (IFUSP) e Roberto Frussa Filho (Presidente) (UNIFESP).
Período: de 05 a 09 de junho de 2006.

Concurso de Livre-Docência junto ao Departamento de Engenharia de Sistemas Eletrônicos - PSI da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.
Especialidade: “Nanoeletrônica”.
Candidato: Prof. Dr. João Francisco Justo Filho.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Carlos Seabra (EPUSP), Henrique Eisi Toma (IQUSP), Jacobus Willibrordus Swart (FEEC-UNICAMP), José Roberto Castillo Piqueira (EPUSP) e Marília Junqueira Caldas (IFUSP).
Período: de 27 a 29 de novembro de 2006.

Nei Fernandes de Oliveira Jr.
Manoel José Mendes Pires (Tese de Doutorado - Instituto de Física “Gleb Wataghin” da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP).
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Alberto Passos Guimarães Filho (CBPF), Edson Corrêa da Silva (Orientador) (IFGW-UNICAMP), Marcel Knobel (IFGW-UNICAMP), Mário Eusébio Foglio (IFGW-UNICAMP) e Nei Fernandes de Oliveira Jr. (IFUSP),
Data: 03 de fevereiro de 2006.

Avaliação de Memorial para a promoção ao nível de Professor Titular da Carreira Docente, junto ao Centro Universitáriio da FEI.
Candidato: Prof. Dr. Vagner Bernal Barbeta.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Francisco Ambrózio Filho (Presidente) (FEI), Francisco Enéas Cunha Lemos (FEI), Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP), Marcio Rillo (FEI) e Nei Fernandes de Oliveira Jr. (IFUSP).

Data: 03 de dezembro de 2006.

Carlos Alberto Rodrigues (Tese de Doutorado - Escola de Engenharia de Lorena, Lorena, SP). Título da Tese: "Desenvolvimento e Caracterização de Supercondutores de Nb_3Sn com Centros de Aprisionamento de Cu(Sn) em Escala Nanométrica".
Comissão Examinadora: Prof. Dr. Cristina Bórmio Nunes (EEL-USP Lorena), Durval Rodrigues Jr. (EEL-USP Lorena), Luis Rogério de Oliveira Hein (FEG-UNESP), Nei Fernandes de Oliveira Jr. (IFUSP) e Wilson Aires Ortiz (UFSCar).
Data: 27 de junho de 2006.

Renato de Figueiredo Jardim
Concurso Público de Provas e Títulos para o Provimento de um Cargo de Professor Titular, junto ao Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP.
Inscritos: Profs. Drs. José Pedro Rino, José Antonio Eiras e Wilson Aires Ortiz.
Indicado: Prof. Dr. Wilson Aires Ortiz.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Aldo Felix Craievich (IFUSP), Antônio Fernando Ribeiro de Toledo Piza (IFUSP), Ivan da Costa Cunha Lima (IF-UERJ), Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP) e Rolando Koberta (Presidente) (IFSC-USP).
Período: de 22 a 25 de maio de 2006.

Ariana de Campos (Tese de Doutorado - Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP).
Título da Tese: "Estudo dos Efeitos Magnetocalórico em Compostos de $MnAs_{1-x}A_x$, A = P, Sb, Te e $Mn_{1-x}Fe_xA$".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Flávio C.G. Gandra (IFGW-UNICAMP), Pascoal José Giglio Pagliuso (IFGW-UNICAMP), Pedro Jorge Von Ranke Perlingeiro (IF-UERJ), Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP), Sérgio Gama (Orientador) (IFGW-UNICAMP).
Data: 26 de maio de 2006.

Nelson Guilherme Castelli Astrath (Tese de Doutorado - Departamento de Física, Centro de Ciências Exatas da Fundação Universidade Estadual de Maringá, Maringá, PR).
Título da Tese: "Determinação e Análise de Propriedades Térmicas e Ópticas de Sólidos não Cristalinos em Altas e Baixas Temperaturas".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antônio Ferreira da Silva (IF-UFBa), Ervin Kaminski Lenzi (DF-UEM), Fernando Luiz de Araújo Machado (DF-UFPE), Mauro Luciano Baesso (DFI-UEM), Luiz Roberto Evangelista (DFI-UEM) e Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP).
Data: 29 de setembro de 2006.

João Paulo Barros Machado (Tese de Doutorado - Escola de Engenharia de Lorena da Universidade de São Paulo, Lorena, SP).
Título da Tese: "Redução do Teor de Inorgânicos em Celulignina via Lixiviação e Separação Magnética de Alto Gradiente (HGMS) visando sua Aplicação comoo Combustível Catalítico".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Adão Benvindo da Luz (CETEM-MCT-RJ), Álvaro Soares Guedes (RM-GPC), Ângelo Capri Neto (EEL-USP), Cristina Nues (Orientadora) (EEL-USP), Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP) e Vladimir Jesus Trava Airoldi (INPE).
Data: 06 de outubro de 2006.

Raiden Cobas Acosta (Tese de Doutorado - Centro de Ciências Exatas da Natureza da Universidade Federal de Pernambuco, Recife, Pe).
Título da Tese: "Propriedades Magnéticas, Supercondutoras e de Transporte do Rutenocuprato $RuSr_2GdCu_2O_8$".
Comissão Examinadora: Profs. Drs. André Galembeck (DF-UFPE), Antônio Carlos Pavão (Co-Ortientador) (DF-UFPE), José Albino Oliveira de Aguiar (Orientador) (DF-UFPE), José Marcílio Cavalcante Ferreira (DF-UFPE), Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP) e Yogendra P. Yadava (DF-UFPE).
Data: 15 de dezembro de 2006.

Luzeli Moreira da Silva (Tese de Doutorado - Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP).
Título da Tese: "Estudo do Efeito Magnetocalórico em Compostos UM_2, $U(Ga,M)_2$ e $(U,R)Ga_2$"
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Flávio César Guimarães Gandra (Orientador) (IFGW-UNICAMP), Hortêncio Alves Borges (IF-PUC-RJ), Marcelo Knobel (IFGW-UNICAMP), Nilson Antunes de Oliveira (IF-UERJ), Pascoal José Giglio Pagliuso (IFGW-UNICAMP), Renato de Figueiredo Jardim (IFUSP) e Yakov Veniaminovich Kopelevich ((IFGW-UNICAMP).
Data: 20 de dezembro de 2006.

Sylvio Roberto Accioly Canuto
Pavel Leiva Ronda (Tese de Doutorado - Departamento de Física General y Matemáticas, Facultad de Ciências y Tecnologías Nucleares, Instituto Superior de Tecnologias y Ciencias Aplicadas, La Habana, Cuba).
Título da Tese: "Aplicaciones de Funcionales de Orbitales Naturales para el Cálculo de Propiedades Moleculares".
Prof. Dr. Mario Piris Silvera (Orientador) (Instituto Superior de Tecnologias y Ciencias Aplicadas).
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Antonio Varandas (Universidade de Coimbra, Portugal), Aurora Pirez (Instec, Cuba) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (Instituto de Física da Universidade de São Paulo, Brasil).
Data: 13 de fevereiro de 2006.

Concurso Público para o Provimento de um Cargo de Professor Titular, junto à Universidade Federal Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ.
Comissão Julgadora: Profs. Drs. Carlos Rettori (IFGW-UNICAMP), Fernando Zawislak (IF-UFRGS), Lívio Amaral (IF-UFRGS), Luiz Felipe Canto (IF-UFRJ), Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP).
Período: de 24 a 25 de maio de 2006.

Concurso para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor, junto à Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, MG.
Inscrita e indicada: Dra. Ana Cláudia Monteiro Carvalho.
Comissão Julgadora: Profs. Drs. Marisa Grassi (UNIFEI), Paulo Monteiro Vieira Braga Barone (UFJF), Roberto Claudino da Silva (UNIFEI) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (Presidente) (IFUSP).
Período: de 31 de maio a 1º de junho de 2006.

Concurso para o Provimento de um Cargo de Professor Doutor, junto à Universidade Federal do ABC, Santo André, SP.
Inscritos: 83.
Indicados: Drs. Gustavo Martini Dalpian, Márcia Tsuyama Escote, Eudes Eterno Fileti, Marcelo Zanutello, Gustavo Michel Mendoza La Torre e Marcelo Oliveira da Costa Pires.
Comissão Julgadora: Profs. Drs. Alfredo Gontijo de Oliveira (DF-UFMG), Luiz Eduardo Moreira Carvalho de Oliveira (IFGW-UNICAMP) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (Presidente) (IFUSP).
Período: de 05 a 09 de junho de 2006.

Francisco Alberto Fernandez Lima (Tese de Doutorado - Departamento de Física da Pontifícia Universidade Católica, Rio de Janeiro, RJ).
Título da Tese: “Dessorção Induzida por Laser em Insulina, Carbono e Haletos Alcalinos”.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Edwin Pedrero González (Universidad de La Habana, Cuba), Ênio Frota da Silveira (PUC-RJ), Marco Antônio Chaer Nascimento (IQ-UFRJ), Marco Cremona (PUC-RJ), Maria Luiza Rocco Duarte Pereira (IQ-UFRJ) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP).
Data: 23 de junho de 2006.

Renato Luis Tâme Parreira (Tese de Doutorado - Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Ribeirão Preto, SP).
Título da Tese: “As Ligações de Hidrogênio e o Efeito do Substituinte - Influência na Ressonância e Aromaticidade de Cátions e Ácidos Orgânicos”.
Comissão Examinadora: Profs. Drs. Albérico Borges Ferreira da Silva (IQSC/USP), Frank Herbert Quina (IQUSP), Roy Edward Bruns (IQ-UNICAMP), Sérgio Emanuel Galembeck (Orientador) (FFCLRP) e Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP).
Data: 11 de julho de 2006.

3.7 Participação em Conselhos, Comissões e Grupos de Trabalho de Entidades Oficiais ou Privadas:

Adalberto Fazzio
Consultor da Área de Ciências Físicas da Academia Brasileira de Ciências (mandato: a partir de junho de 2005).

Membro da Electrochemical Society.

Membro do Comitê Editorial do CNPq (mandato: de 1º de maio de 2006 a 30 de abril de 2009.

Membro Titular da Academia Brasileira de Ciências.

Presidente da Sociedade Brasileira de Física (mandato: julho de 2005 a julho de 2007).

Tesoureiro da Comissão da Olimpíada Brasileira de Física.

Antônio José Roque da Silva
Vice-Presidente da Comissão da Olimpíada Brasileira de Física.

Helena Maria Petrilli
Membro do Comitê Internacional de Interações Quadrupolares (mandato: de 2005 a 2008).

Lucy Vitória Credidio Assali
Membro do Conselho Diretor do Laboratório de Computação Científica Avançada LCCA/CCE/USP (a partir até julho de 2006).

Marília Junqueira Caldas
Membro do Corpo Editorial da Physica Status Solidi c (a partir de 2006).

Membro do Conselho da Sociedade Brasileira de Física (mandato: de 2005 a 2007).

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

Membro do International Program Committee of the International Conference on Defects in Semiconductors (ICDS-24).

Presidente do Conselho Diretor do Laboratório de Computação Científica Avançada LCCA/CCE/USP (mandato: de outubro de 2000 até julho de 2006).

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

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

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

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

Membro do Grupo de Trabalho para a Elaboração do Plano Diretor para o Desenvolvimento do Ensino Superior Público do Estado de São Paulo, conforme o Ofício GR/181, de 1º.04.2005 (a partir de abril de 2005).

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Editor Associado do Brazilian Journal of Physics.

Membro do Corpo Editorial da Chemical Physics Letters.

Membro do Corpo Editorial da Computer Physics Communications.

Membro do Corpo Editorial da International Journal of Quantum Chemistry.

Membro do Corpo Editorial do Journal of Computational Methods in Science and Technology.

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

4 ATIVIDADES DE PESQUISA

4.1 Grupos de Pesquisa:

Grupo Teórico de Estrutura Eletrônica de Materiais

Docentes:
Adalberto Fazzio
Antônio José Roque da Silva
Armando Corbani Ferraz
Helena Maria Petrilli

Kazunori Watari
Lucy Vitória Credidio Assali
Maria Cristina dos Santos
Marília Junqueira Caldas
Sylvio Roberto Accioly Canuto

Pós-Doutorandos:
Alexandre Reily Rocha - Fonte financiadora: FAPESP (a partir de dezembro) (em andamento, solicitação de inscrição no Programa de Pós-Doutorado da Universidade de São Paulo)
Herbert de Castro Georg - Fonte financiadora: FAPESP (a partir de agosto)
Ronaldo Giro - Fonte financiadora: FAPESP
Valdemir Enéias Ludwig - Fonte financiadora: FAPESP

Doutorandos:
Cedrid Rocha Leão - Fonte financiadora: FAPESP
Edwin Hobi Jr. - Fonte financiadora: FAPESP
Ferenc Diniz Kiss - Fonte financiadora: CAPES
Gustavo Troiano Feliciano - Fonte financiadora: CNPq
Henady Malarenko Júnior - Fonte financiadora: sem bolsa
Herbert de Castro Georg - Fonte financiadora: FAPESP
Ivana Zanella da Silva - Fonte financiadora: CNPq
Jeverson Teodoro Arantes Jr. - Fonte financiadora: FAPESP
Joelson Cott Garcia - Fonte financiadora: CAPES
Luana Sucupira Pedroza - Fonte financiadora: FAPESP (até agosto)
Marcelo Alves dos Santos - Fonte financiadora: FAPESP
Marcos Brown Gonçalves - Fonte financiadora: CNPq (a partir de outubro)
Matheus Paes Lima - Fonte financiadora: FAPESP
Moisés Román Parisuaña Ito - Fonte financiadora: CLAF
Ney Sodré dos Santos - Fonte financiadora: CAPES
Rafael Carvalho Barreto - Fonte financiadora: FAPESP (a partir de novembro)
Renato Borges Pontes - Fonte financiadora: FAPESP
Regina Lélis de Sousa - Fonte financiadora: CAPES
Rodrigo Garcia Amorim - Fonte financiadora: CNPq
Rolando Larico Mamani - Fonte financiadora: CNPq
Thaciana Valentina Malaspina Fileti - Fonte financiadora: CNPq
Thiago Barros Martins - Fonte financiadora: FAPESP
Vagner Alexandre Rigo - Fonte financiadora: CAPES/PROCAD

Mestrandos:

Alberto Torres Riera Júnior - Fonte financiadora: CNPq
José Eduardo Padilha de Souza - Fonte financiadora: CAPES
Luana Sucupira Pedroza - Fonte financiadora: FAPESP (até agosto)
Lucas Viani - Fonte financiadora: FAPESP
Marcelo Luiz da Silva - Fonte financiadora: CAPES
Marcelo Maia Garcia - Fonte financiadora: sem bolsa

Marco Aurélio Poles de Souza - Fonte financiadora: sem bolsa (matrícula trancada)
Marcos Brown Gonçalves - Fonte financiadora: sem bolsa
Mariana Rossi Carvalho - Fonte financiadora: FAPESP
Rafael Carvalho Barreto - Fonte financiadora: FAPESP
Rodrigo Ramos da Silva - Fonte financiadora: CNPq
Sandro Inácio de Souza - Fonte financiadora: CNPq

Iniciação Científica:
Carlos Felipe Alves dos Santos - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC
Elton José Figueiredo de Carvalho - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC
Gabriela Iunes Depetri - Fonte financiadora: sem bolsa
Leonardo Matheus Marion Jorge - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC

Colaboradores Permanentes:
Fernando Alvarez (Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP)
Frederico Ayres de Oliveira Neto (Departamento de Matemática, Instituto de Ciências Exatas e Naturais da Universidade Federal do Mato Grosso, Rondonópolis, MT)
João Francisco Justo Filho (Departamento de Engenharia de Sistemas Eletrônicos - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo)
Kaline Rabelo Coutinho (Departamento de Física Geral do IFUSP)
Sonia Frota-Pessôa
Wanda Valle Marcondes Machado

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:
Alex Antonelli (Instituto de Física da Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, São Paulo) - visitas curtas.

Ângela Burlamaqui Klautau (Departamento de Física, Universidade Federal do Pará, Belém, Pará). Período: de 15 a 27 de dezembro de 2006.

Antônio Joaquim Campos Varandas (Universidade de Coimbra, Portugal). Período: de 23 a 24 de novembro de 2006.

Benedeta Mennucci (Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale, Universita degli Studidi Pisa, Itália). Período: de 03 a 05 de setembro de 2006.

Demétrio A. da Silva Filho (Georgia Institute of Technology School of Chemistry & Biochemistry, Atlanta GA, EUA). Data: 21 de março de 2006.

Douglas Soares Galvão (Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP) - visitas curtas

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

Florian Müller-Plathe (Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie, Technische Universität Darmstadt, Alemanha). Período: de 13 a 16 de março de 2006.

Franca Manghi (INFM - National Research Center on nanoStructures and bioSystems at Surfaces (S3), Universidade de Modena, Departamento de Física, Modena, Itália). Período: 24 a 26 de agosto de 2006.

Geerd H.F. Diercksen (Max Planck Institut fur Astrophysik, Alemanha). Período: de 23 de novembro a 06 de dezembro de 2006.

Germán Nicolás Darriba (Universidade de La Plata, Argentina). Período: de 23 novembro a 23 de dezembro de 2006.

João Francisco Justo Filho (Escola Politécnica da Universidade de São Paulo) - visitas curtas.

Klaus Werner Capelle (Instituto de Física de São Carlos-IFSC/USP, São Carlos, São Paulo) - visitas curtas.

Leonardo Antonio Errico (Departamento de Física, Facultad de Ciências Exactas, Universidad Nacional de La Plata, Argentina). Período: de 02 a 23 de dezembro de 2006.

Luis Serrano-Andrés (Instituto de Ciencia Molecular, Universita de Valéncia, Espanha). Data: 11 de agosto de 2006.

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

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

Roberto Rivelino de Melo Moreno (Departamento de Física, Universidade Federal da Bahia, Salvador, Bahia). Período: de 07 a 13 de agosto de 2006.

Rodrigo do Monte Gester (Universidade Federal de Belém do Pará, Centro de Ciências Exatas e Naturais, Departamento de Física, Belém, Pará). Período: de 13 novembro de 2006 a 31 de janeiro de 2007.

Ronei Miotto (Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC, São Paulo). Período: de 1º de agosto a 30 de dezembro de 2006.

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

Stefaan Cottenier (Universidade Católica de Leuven, Bélgica). Período: de 01 de julho a 30 de agosto de 2006.

Tapan Kumar Das (Department of Physics, University of Calcutta, Índia). Período: de 06 de março a 22 de maio de 2006).

Tertius Lima da Fonseca (Instituto de Física, Universidade Federal da Goiás, Goiânia, Goiás). Período: de 09 de janeiro de 2006 a 08 de janeiro de 2007.

Pesssoal Administrativo:

Marisa Fernandes da Silva
Sandra Regina Rodrigues Ribeiro

Pesssoal Técnico:

Marcelo Maia Garcia (término do PROCONTES em junho)

Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas (LESBT)

Grupo de Baixas Temperaturas

Docentes:
André Bohomoletz Henriques
Armando Paduan Filho
Ewout Ter Haar
Nei Fernandes de Oliveira Júnior
Rafael Sá de Freitas (a partir de julho)
Valdir Bindilatti
Valmir Antônio Chitta (Departamento de Física Geral)

Pós-Doutorando:
Xavier Pierre Marie Gratens - Fonte financiadora: CNPq (até junho)

Sérgio Turano de Souza
Bolsa do CNPq, na modalidade DTI - Desenvolvimento Tecnológico e Industrial /7E (PCI/DTI-7E)/INPE
Processo CNPq n^{o}: 382839 /2004-8
Projeto: "O Detector de Ondas Gravitacionais Mario Schenberg: Uma Antena Esférica Criogênica com Transdutor Paramétricos de Cavidade Fechada".
Responsável: Prof. Dr. Odylio Denys de Aguiar.
Equipe envolvida (INPE): Profs. Drs. Odylio Denys de Aguiar (Pesquisador Titular), José Carlos Neves da Araújo (Pesquisador Associado), Sérgio Ricardo Furtado (Técnico), Jorge Weber Santana do Nascimento (Assistente em C&T), José Luiz Melo (Pós-Doutor/FAPESP), três alunos de pós-graduação e quatro de graduação.
Vigência: de 1º de outubro de 2004 a 30 de setembro de 2006.

Xavier Pierre Marie Gratens
Bolsa do CNPq, na modalidade DTI - Desenvolvimento Tecnológico e Industrial /7B/ IFUSP
Processo CNPq n^{o}: 384727/2006-9.
Projeto: "Montagem, Teste e Operacionalização do Sistema de Transdução Paramétrica e do Sistema de Refrigeração por Diluição 3He/4He, do Detector de Ondas Gravitacionais Mário Schenberg".
Responsável: Prof. Dr. Odylio Denys de Aguiar.

Equipe envolvida: Profs. Drs. Nei Fernandes de Oliveira Jr. e Odylio Denys de Aguiar.
Vigência: de 1º de julho de 2006 a 30 de abril de 2008.

Doutorandos:
Giovani Decot Galgano - Fonte financiadora: CNPq (a partir de outubro)
Ricardo Faveron de Oliveira - Fonte financiadora: CAPES
Sérgio Turano de Souza - Fonte financiadora: sem bolsa

Mestrando:
Maurício Alarcon Manfrini - Fonte financiadora: CNPq

Iniciação Científica:
Giovani Decot Galgano - Fonte financiadora: CNPq/PIBIC (até setembro)

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:

Benjamin A. Piot (Grenoble High Magnetic Field Laboratory, Centre National de la Recherche Scientifique, Grenoble, France). Período: de 08 a 21 de dezembro de 2006.

Duncan K. Maude (Grenoble High Magnetic Field Laboratory, Centre National de la Recherche Scientifique, Grenoble, France). Período: de 01 a 13 de setembro de 2006.

Gerhard Salinger (National Science Foundation, EUA). Data: 02 de outubro de 2006.

Odylio Aguiar (Instituto Nacional de Pesquisas Especiais - INPE, São José dos Campos, SP) - visitas curtas.

Thomas Holubar (Cryogenics, Londres, Inglaterra). Período: de 30 de janeiro a 05 de fevereiro de 2006.

Yaacov Shapira (Tufts University, Boston, USA). Período: de 30 de março a 19 de abril de 2006.

Grupo de Transição de Fase e Supercondutividade

Docentes:
Carlos Castilla Becerra
Renato de Figueiredo Jardim

Pós-Doutorando:
Ernesto Govea Alcaide - Fonte financiadora: FAPESP (a partir de julho)

Doutorandos:
José Antônio de Souza - Fonte financiadora: FAPESP (até março)
Sueli Hatsumi Masunaga - Fonte financiadora: FAPESP

Zulmara Virgínia Carvalho - Fonte financiadora: FAPESP (até março)

Mestranda:
Solange de Andrade - Fonte financiadora: FAPESP

Colaborador e Pesquisador Visitante:
Pedro Demetrio Muñe Bandera (Faculdade de Ciências Naturais da Universidade do Oriente, Santiago de Cuba, Cuba). Período: de 29 de abril a 30 de julho de 2006.

Pessoal Técnico:
Carlos Alberto Barioni
Eronides Alves de Almeida
Flavio do Carmo Fontenelle
Olímpio 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
Daniel Reinaldo Cornejo
Gerardo Fabián Goya
Hercílio Rodolfo Rechenberg

Pós-Doutorandos:
Ana Lúcia Brandl - Fonte financiadora: FAPESP (até junho de 2006)
Ênio Lima Jr. - Fonte financiadora: convênio entre o IFUSP e o Institüt für Neue Materialien - Saabrücken Alemanha (até janeiro de 2006).
Ênio Lima Jr. - Fonte financiadora: FAPESP (a partir de dezembro de 2006)

Doutorandos:
Fábio de Oliveira Jorge - Fonte financiadora: sem bolsa
Mariana Pojar - Fonte financiadora: CNPq
Narcizo M. Souza Neto - Fonte financiadora: CNPq
Rafael Alejandro Cajacuri Merino - Fonte financiadora: FAPESP
Thiago Ribeiro Fonseca Peixoto - Fonte financiadora: CNPq

Mestrando:
Amanda Defendi Arelaro - Fonte financiadora: FAPESP (a partir de 1º.08.2006)

Charles da Rocha Silva - Fonte financiadora: CAPES
Leonardo Alonso - Fonte financiadora: CAPES
Waldir Leles Martins Filho - Fonte financiadora: CNPq

Iniciação Científica:
Amanda Defendi Arelaro - Fonte financiadora: FAPESP (até 31.07.2006)
Carlos Eduardo S. Rossati - Fonte financiadora: sem bolsa
Felipe Belonsi de Cintra - Fonte financiadora: CNPq
Fabiana Rodrigues Arantes - Fonte financiadora: CNPq
Erick Aragão Vermot - Fonte financiadora: FAPESP
Gabriel Teixeira Landi - Fonte financiadora: sem bolsa
Maria Fernanda Araújo de Rezende - Fonte financiadora: sem bolsa
Roberto Isamu Ono Filho - Fonte financiadora: sem bolsa

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:
Luiz Carlos Sampaio Lima (CBPF - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, RJ). Período da visita: de 28 de novembro a 01 de dezembro de 2006.

Yves Souche (Laboratoire Louis Neél - CNRS, Grenoble, França). Períodos: de 12 de março a 02 de abril; de 12 a 26 de outubro de 2006.

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:
Alain André Quivy (Departamento de Física Experimental)
Euzi Conceição Fernandes da Silva
Guennadii Michailovitch Gusev
Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Pós-Doutores:
Ana Melva Farfan - Fonte financiadora: FAPESP (a partir de dezembro)
Celso de Araújo Duarte - Fonte financiadora: FAPESP (a partir de setembro)
Marcelo Marques - Fonte financiadora: FAPESP
Tomás Erikson Lamas - Fonte financiadora: FAPESP

Doutorandos:
Angela Maria Ortiz de Zevallos Marquez - Fonte financiadora: CNPq
Celso de Araújo Duarte - Fonte financiadora: CNPq
Ivan Ramos Pagnossin - Fonte financiadora: FAPESP
Joelson Cott Garcia - Fonte financiadora: CAPES
Luis Enrique Gómez Armas - Fonte financiadora: CNPq/CLAF
Niko Churata Mamani - Fonte financiadora: FAPESP

Mestrandos:
Alvaro Diego Bernardino Maia- Fonte financiadora: sem bolsa
Mauro Fernando Soares Ribeiro Jr. - Fonte financiadora: CNPq
Sérgio Takimoto Maurício - Fonte financiadora: sem bolsa

Colaboradores e Pesquisadores Visitantes:

Ajit Kumar Meikap (National Institute of Technology, Durgapur, Deemed University, West Bengal, India). Período de 02 de junho de 2006 a 1o de junho de 2007.

Askhat Bakarov (Institute of Semiconductor Physics, Russian Academy of Science, Moscow, Russia). Período: de 15 de fevereiro a 15 de maio de 2006.

Donat Joseph As (Universidade de Paderborn Paderborn, Alemanha). Período: de 08 a 22 de agosto de 2006.

Duncan K. Maude (Grenoble High Magnetic Field Laboratory, Grenoble, França). Período: de 1º a 13 de setembro de 2006.
Jean-Claude Portal (Grenoble High Magnetic Field Laboratory, Grenoble, França). Período: de 19 a 26 de maio de 2006.

Luiz Guimarães Ferreira (Instituto de Física da Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, São Paulo) - visitas semanais.

Stefan Potthast (University of Paderborn - Department of Physics, Paderborn, Alemanha). Período: de 27 de setembro a 24 de outobro de 2006.

Pessoal Técnico:
José Geraldo Chagas

Pessoal Administrativo:
Tatiana Lacerda costa

4.2 Trabalhos em Andamento ou Concluídos em 2006:

Grupo Teórico de Materiais
Coordenadores: Adalberto Fazzio, Sylvio Canuto, Marília Junqueira Caldas, Armando Corbani Ferraz e Maria Cristina dos Santos

"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, o Prof. Eduardo Kojy Takahashi da Universidade Federal de Uberlândia, o Prof. G.P. Srivastava da Universidade de Exeter, Inglaterra e os estudantes de pós-graduação Ferenc Diniz Kiss e Sandro Inácio de Souza.

"Estrutura Eletrônica de Átomos, Moléculas e Clusters. Sistemas Isolados e em Fase Líquida"
Canuto, S.

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

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

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

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

"Propriedades Eletrônicas, Óticas e Magnéticas de Materiais"
Caldas, M.J. e Petrilli, H.M. (Grupo NanoMol)

Utilizando diferentes abordagens (quânticas, clássicas e estatísticas), realizamos simulações computacionais para o estudo de propriedades eletrônicas, óticas e magnéticas de materiais. Nosso interesse está, no momento, voltado, sobretudo, para o estudo dos seguintes temas:

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

ii) Sistemas Moleculares de Interesse Biológico ou Tecnológico – Esclarecer aspectos conformacionais (geométricos) e eletrônico de materiais de interesse biológico e/ou tecnológico, em especial proteínas de cobre;

iii) Sistemas Semicondutores Complexos – Estudo a nível microscópico de nanoestruturas semicondutoras híbridas orgânico-inorgânico, desde a atomística estrutural até propriedades eletrônicas;

iv) Magnetismo – Comportamento magnético local e propriedades hiperfinas para impurezas metais de transição em hospedeiros metais de transição e metais nobres, sistemas granulares que apresentam magnotoresistência gigante tais como grãos de Fe em Ag ou Cu e intermetálicos;

v) Intermetálicos – Análise sistemática de compostos intermetálicos e diagramas de fases de materiais estruturais como Fe-Mo-Al, a partir de cálculos de primeiros princípios.

“Estrutura Eletrônica de Nanoestruturas de Carbono”
Santos, M.C. dos

Materiais nanoestruturados podem ser definidos como materiais cujos elementos estruturais - aglomerados, cristalitos ou moléculas – têm dimensões entre 1 até 100 nm. Nanociência trata da manipulação da matéria nessa escala. A miniaturização de dispositivos é apenas um dos aspectos interessantes do desenvolvimento da nanociência: a explosão mundial de interesse na pesquisa de materiais nanoestruturados tem origem na riqueza de fenômenos físicos, químicos e biológicos que ocorrem em escala nanoscópica.

As nanoestruturas escolhidas para estudo são formas orgânicas (polímeros conjugados) e inorgânicas (fulerenos e nanotubos) de carbono. Vários compostos pertencentes a essas duas classes de materiais têm sido utilizados na construção de dispositivos eletrônicos moleculares. Esse projeto visa o estudo das propriedades eletrônicas e magnéticas de nanoestruturas de carbono e a manipulação de suas propriedades através

de dopagem química (substituição ou intercalação de outros elementos químicos) ou funcionalização (adição de moléculas lateralmente à estrutura principal). Para isso, utilizamos diversas técnicas de simulação, tais como a Mecânica Molecular, Métodos Quânticos semi-empíricos e Métodos Quânticos *ab initio*. Contamos com a colaboração de grupos experimentais, em particular o grupo do Prof. Dr. Fernando Alvarez, do Instituto de Física Gleb Wataghin da UNICAMP.

"Propriedades Magnéticas e Hiperfinas de Sistemas Metálicos Complexos"
Frota-Pessôa, S.

Temos estudado, utilizando cálculos de estrutura eletrônica, o comportamento magnético (momento magnético orbital e de spin, acoplamento de troca J, etc...) e hiperfino de sistemas metálicos, em sua maioria bastante complexos. Freqüentemente usamos método de primeiros princípios implementado no espaço direto, o que nos permite investigar sistemas com quebra de periodicidade. Estamos interessados em duas áreas principais: i) impurezas e defeitos em hospedeiros metálicos e ii) sistemas à duas dimensões (superfícies, multicamadas, etc...), bem como clusters, adátomos, e outros defeitos nesses sistemas.

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

"Simulação Computacional e Análise de Materiais (SCAM)"
Assali, L.V.C. e Machado, W.V.M.

Nosso interesse é estudar algumas propriedades físicas relacionadas com impurezas que introduzem níveis de energia profundos em semicondutores. O tipo de método teórico a ser utilizado é determinado pelas vantagens que cada tipo de simulação computacional oferece, assim como por suas limitações, na obtenção das propriedades nas quais estamos interessados. Estes projetos têm a participação do Prof. Dr. João Francisco Justo Filho do Departamento de Engenharia de Sistemas Eletrônicos da Escola Politécnica da USP. Destacamos:

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

coulombiana e outro que representa o efeito de polarização induzida. Após esta investigação, iniciamos o estudo da estrutura eletrônica destes centros dentro de um formalismo de primeiros princípios.

b) Cálculos de estrutura eletrônica de defeitos relacionados com metais de transição e terras raras em diamante, Si, BN, GaAs, GaN, SiC e ZnO têm sido efetuados utilizando-se um modelo de super célula (*large unit cell*). Este estudo é feito substitucionais e intersticiais relacionados com metais de transição e terras raras dentro do formalismo FLAPW (full-potential linear augmented-plane wave). Este esquema permite também o estudo de relaxações e distorções do sistema com o que se obtém várias quantidades relevantes na caracterização dos centros, tais como parâmetros hiperfinos, desdobramentos devido ao acoplamento spin-órbita, etc.

"Propriedades de Transportes em Pontos Quânticos"
Watari, K.

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

Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas (LESBT)

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 Quânticas Semicondutoras"
Henriques, A.B.

A miniaturização dos dispositivos eletrônicos em escala nanométrica nos leva ao domínio de efeitos quânticos. Investigamos as possibilidades de controle dos efeitos quânticos em diversos tipos de estruturas, nas quais há restrição do movimento eletrônico em baixa dimensão. Num poço quântico, os elétrons são confinados num espaço bidimensional. Uma redução ainda maior das dimensões resulta em fios e pontos quânticos, que podem ser coplados para formar super-redes ou moléculas artificiais. A interação coulombiana entre elétrons e entre elétrons e o meio cristalino determina as propriedades ópticas e elétricas da estrutura. Utilizamos técnicas de espectroscopia óptica e elétrica em baixas temperaturas e altos campos magnéticos para investigar estas propriedades. O projeto é complementado com simulações da resposta óptica e elétrica destes sistemas, usando modelos quânticos e semi-clássico de Monte Carlo.

O projeto envolve materias magnéticos (nos quais sítios da rede possuem momento magnético), com potencial para aplicação em dispositivos baseados em controle do spin (spintrônica). Nos materiais magnéticos recentemente observamos a indução com a luz de estados eletrônicos com forte polarização de spin, abrindo a perspectiva de um controle do magnetismo com a luz. O projeto é desenvolvido com a colaboração de vários grupos no Brasil e no exterior (UFRJ, INPE, University of Oxford, Universität Dortmund, HFML-Grenoble).

"Magnetismo em Sistemas Orgânicos"
Paduan-Filho, A; Oliveira Jr, N.F. e Lahti, P. (University of Massachusetts, USA)

Caracterização de propriedades estruturais e magnéticas de sistemas que apresentam Magnetismo originados de complexos puramente orgânicos. Preparação e estudos de materiais híbridos orgânico-inorgânicos que apresentam ordenamento magnético. O objetivo é tentar correlacionar a estrutura cristalográfica com o comportamento magnético para esclarecer mecanismos de "exchange" provenientes de radicais "nitroxide". As medidas magnéticas são feitas em altos campos (até 17 Tesla) e baixas temperaturas (até 0.3 K), usando um magnetômetro de amostra vibrante (VSM).

"Ordem Magnética induzida por Campos Magnéticos"
Paduan-Filho, A; Oliveira Jr, N.F. e Gratens, X.

Determinação de transições magnéticas de fase, induzidas por altos campos no sistema $NiCl_2.4SC(NH_2)_2$, que não apresenta ordem magnética a campo zero. Magnetização e susceptibilidade magnética feitas em monocristais em baixas temperaturas, de até 0.02 K, e campos de até 17 Tesla.

"Magnetostricção e Ultrasom em Sistemas Magneticamente Ordenados"
Paduan-Filho, A; Zapf, V. e Jaime, M. (NHMFL) Los Alamos, EUA.

Estudo dos efeitos nas interações magnéticas induzidos por campos magnéticos por meio de medidas de magnetostricção em sistemas com ordem magnética. Medidas dos módulos elásticos usando espectroscopia de ultrasom.

"Sistemas Magnéticos Geometricamente Frustrados"
Freitas, R.S.; Schiffer, P. e N. Samarth (Penn State University, USA), Lau, G. e Cava, R. (Princeton, USA).

Os materiais magnéticos geometricamente frustrados são aqueles em que as interações spin-spin tornam-se frustradas devido à geometria da sub-rede magnética. Em outras palavras, a frustração surge quando o sistema não consegue minimizar todas as interações magnéticas entre pares de spins devido aos vínculos geométricos locais. Temos empregado medidas termodinâmicas e de magnetização a baixas temperaturas no estudo de duas linhas distintas de sistemas: novos materiais magnéticos possuindo alto potencial para ricos e novos fenômenos físicos como os espinélios $CdLn_2Se_4$ (Ln = Dy, Ho) e $CdLn_2S_4$ (Ln = Ho, Er, Tm, Yb), e arranjos de partículas ferromagnéticas nanométricas construídas litograficamente, de forma a se obter um controle ideal das propriedades estruturais e físicas relacionadas à frustração.

Grupo de Transição de Fase e Supercondutividade
Coordenador: Carlos Castilla Becerra

"Determinação de Corrente Crítica em Sistemas Supercondutores Granulares"
Jardim, R.F.

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

"Produção e Caracterização de Óxidos em Sistemas Supercondutores Granulares"
Jardim, R.F.

Estamos estudando as propriedades macroscópicas de óxidos do tipo Ln M Ou; Ou; 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.

"Magnetorresistência Colossal em Manganitas"
Jardim, R.F.

Materiais com fórmula geral $Ln_{1-x}M_xMnO_3$; Ln = terra-rara, M = Ca, Sr, Ba, Pb, apresentam uma variedade enorme de comportamentos magnéticos não usuais. Entre eles o efeito de magnetorresistência colossal. O nosso trabalho consiste em preparar e caracterizar óxidos pertencentes a diversas famílias desses materiais e poder, então, contribuir para um melhor entendimento dos diversos comportamentos interessantes dessa classe de materiais.

"Transição de Fase Metal-Isolante em Niquelatos"
Jardim, R.F.

O presente projeto envolve a preparação e caracterização de óxidos do tipo $LnNiO_3$; Ln = terra-rara, que apresentam transição de fase do tipo metal-

isolante em uma ampla faixa de temperatura. Os materiais são preparados em altas temperaturas e sob pressões de O_2 que podem atingir 120 atm. Esses materiais são então caracterizados via técnicas de difração de raios X, de transporte e magnéticas.

"Produção de Amostras Mono e Policristalinas de Óxidos Supercondutores"
Becerra, C.C. e Jardim, R.F.

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

"Magnetismo em Sistemas Diluídos"
Paduan-Filho, A. e Becerra, C.C.

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

"Estudo das Propriedades de Transporte e Magnéticas de Supercondutores e seus Precursores"
Becerra, C.C. e Jardim, R.F.

O Laboratório de Supercondutividade está apto para caracterizar materiais de uma maneira geral por meio de diversas técnicas, i.g. resistividade elétrica, magnetorresistividade, susceptibilidade magnética ac e dc, número de Hall, curvas características V x 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 x 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

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.

"Estudo de Compostos Intermetálicos $A(Fe_{1-x}Cr_x)_2$ (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_C = 600 K) e o segundo é um antiferromagneto itinerante tipo "spin density wave", com T_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 $Zr(Fe_{1-x}Cr_x)_2$.

"Hidrogênio em compostos intermetálicos: magnetismo e difusão"
Rechenberg, H.R e Mestnik, J. (IPEN)

Serão investigados os efeitos de absorção de hidrogênio sobre as propriedades magnéticas e hiperfinas de compostos intermetálicos AB_2, onde A = Zr ou Ta e B = V ou Cr, com substitução de <1% de ^{57}Fe. Os objetivos da pesquisa são dois: (1) Estudar, através de medidas de

magnetometria, suscetometria e espectrometria Mössbauer com campo aplicado, as condições de formação de um momento magnético localizado nos átomos de Fe, com ou sem hidrogênio incorporado à rede cristalina. A expectativa é que o hidrogênio favoreça a formação do momento, uma vez que a forte dilatação volumétrica causada pelo H provoca um estreitamento da banda 3d. (2) Estudar o efeito do movimento difusivo dos átomos de H sobre as interações hiperfinas do Fe em função da temperatura, e interpretar os resultados à luz de modelos existentes sobre os diferentes tipos de salto atômico na estrutura cristalina da fase de Laves.

"Obtenção e Caracterização de Arranjos Auto-organizados de Nanofios de Metais de Transição"

Cornejo, D.R.; Silva, C.R.; Peixoto, T.R.F.; Arantes, F.R.; Azevedo, A. e Padrón-Hernández, E. (Universidade Federal de Pernambuco)

Nos últimos anos surgiu um grande interesse na síntese e caracterização de estruturas unidimensionais (1D). Nanofios de materiais magnéticos são uma classe importante de estruturas 1D por constituírem uma possível mídia para armazenamento de dados. Nanofios de elementos puros, óxidos, nitretos, carbonetos e outros compostos são obtidos por variadas técnicas químicas e físicas. Por outro lado, arranjos auto-organizados de nanofios ferromagnéticos são sistemas ideais para estudar magnetismo mesoscópico, porque os radios e distâncias entre fios, sendo de poucos nanômetros, são comparáveis às distâncias características relevantes do sistema. Assim, existem muitos fenômenos e propriedades a serem explorados e explicados nestes novos materiais.

Recentemente o LMM adquiriu autonomia para a fabricação dos arranjos mencionados mediante a compra de um potenciostato de alta qualidade. Nanofios de Fe, Co, Ni e ligas destes elementos estão sendo eletrodepositados em lâminas nanoporosas de alumina anodizadas pelo método de anodização de dois passos. Estudamos a inversão da magnetização, o papel das diferentes interações envolvidas, as propriedades estáticas e dinâmicas e a estabilidade térmica da magnetização nas nanoestruturas obtidas.

"Estudo Experimental e Teórico de *Exchange-Bias* em Multicamadas Heterogêneas Nanoestruturadas"

Cornejo, D.R. e Alonso, L.

Nesta linha de pesquisa estamos obtendo via *sputtering* diversos filmes finos com estrutura de multicamadas heterogêneas, envolvendo materiais ferromagnéticos e antiferromagnéticos, de maneira que as características magnéticas das nanoestruturas sejam dominadas pela presença de anisotropia unidirecional entre as camadas. Em particular, focalizamos nossa atenção no estudo dos mecanismos responsáveis pelo melhoramento da coercividade de camadas ferromagnéticas de Permalloy, Co-Pd e Co-Pt nas

heteroestruturas AF/FM. Estudamos também os efeitos das interações magnéticas entre as camadas na inversão da magnetização, e no efeito *trainning*. Modelos micromagnéticos e fenomenológicos serão desenvolvidos para integrar experimento e teoria.

"Estudo do Comportamento Magnético Dinâmico e Estático de Cristais Líquidos Ferronemáticos"
Cornejo, D.R., Gómez, S.L. e Figueiredo Neto, A.M.

É bem conhecido que a adição de uma quantidade pequena de um ferrofluído apropriado a um cristal líquido diminui o campo magnético necessário para orientar o momento magnético desde 10^4Oe a valores próximos dos 100 Oe. Porem, o mecanismo específico que controla este processo não é claramente entendido. Assim, estes sistemas apresentam fenômenos interessantes que os tornam atrativos para pesquisa e busca de novas aplicações.
Nesta linha de pesquisa estamos estudando o comportamento magnético dinâmico e estático de uma mistura de laurato de potássio, 1-decanol e agua. O sistema apresenta intrigantes comportamentos magnéticos, caracterizados por irreversibilidades nas curvas ZFC-FC e histereses térmicas na faixa de temperaturas 260-320 K.

"Propriedades Magnéticas de Vidros Metálicos Maciços a Base de Fe e FeCo"
Cornejo, D.R.; Rechenberg, H.R. e Cintra, F.B.

Recentemente, novos sistemas de vidros metálicos foram descobertos com a particularidade de que a taxa de resfriamento necessária para obter o estado vítreo (~ 10^2 K/s) é bem menor do que nos vidros metálicos convencionais (~ 10^6 K/s), facilitando assim a obtenção de peças maciças feitas destes materiais. Atualmente, estima-se que mais de 1000 sistemas de ligas podem ser produzidos em forma maciça e que aproximadamente 50% destes sistemas foram descobertos nos últimos cinco anos. Isto faz com que o estudo e a otimização das propriedades de vidros metálicos maciços de alta susceptibilidade magnética, e a procura por novas composições de ligas vítreas, seja um tópico de elevado interesse para a área dos materiais magnéticos.

No presente projeto estamos estudando as propriedades magnéticas de vidros metálicos maciços baseados em Fe e Fe-Co, particularmente ligas de Fe-Cr-Mo-Ga-P-B-C, Fe-Al_Ga-P-B-Si e Co-Fe-Ta-B. Estamos determinando as condições ótimas de preparação e composição das ligas. Visamos também realizar uma investigação exaustiva das propriedades destas novas ligas em altas freqüências.

"Estudo das Propriedades Magnéticas de Filmes Finos de PdCo, WCo e SmCo obtidos por eletrodeposição"

Noce, R.D.; Barelli, N. e Benedetti, A.V. (UNESP-Araraquara); Sumodjo, P.T.A (IQ-USP) e Cornejo, D.R.

A eletrodeposição é um processo químico que permite a obtenção de filmes finos de diversa natureza com alta pureza e relativamente baixo custo. Recentemente foi verificado que o controle adequado do pH do eletrólito durante o processo de eletrodeposição em ligas contendo Co permite controlar o tamanho das partículas obtidas sem mudanças apreciáveis na composição do composto.
Neste trabalho, estamos estudando as características estruturais e magnéticas em filmes finos isotrópicos de PdCo, WCo e SmCo obtidas por eletrodeposição com controle do pH. Em particular, estamos estudando o processo de inversão da magnetização e a determinação das condições ótimas para a obtenção de materiais de alta anisotropia magnetocristalina com este método de fabricação nas ligas de PdCo e SmCo; e o comportamento da magnetização em baixas temperaturas e a otimização das condições para a obtenção de alta susceptibilidades magnéticas nas ligas de WCo.

"Estudo das Propriedades Magnéticas de Ferritas Nanoestruturadas de NiZn dopadas com Cr e de NiZn dopadas com Sm"
Gama, L.; Costa, A.C.F.M. (Universidade Federal de Campina Grande) e Cornejo, D.R.

Ferritas de NiZn possuem destacáveis propriedades magnéticas com importantes aplicações industriais. Nos últimos anos, muitos trabalhos tem sido realizados pesquisando os efeitos da substituição parcial do Fe por ions diamagnéticos ou paramagnéticos visando melhorar as propriedades magnéticas de ferritas de NiZn.

Nesta linha de pesquisa estamos estudando os efeitos na microestrutura e nas propriedades magnéticas estáticas e dinâmicas da substituição parcial do Fe, por átomos de Cr e de Sm, em ferritas nanoestuturadas de NiZn.

"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 (1nm = 10^{-9}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 do Magnetismo em Nanopartículas e Coloides magneticos com potenciais aplicacoes Clínicas"
Goya, G.F.; Rechenberg, H.R.; Itri, R.; Tourinho, F.A. e Depeyrot, J. (Universidade de Brasília)

Esta pesquisa está orientada ao estudo das interações magnéticas nos sistemas de nanopartículas de Fe3O4 até aqui estudados, que são constituentes de ferrofluidos de uso clínico como agentes de contraste para Imagens por Ressonância Magnética. Os efeitos das excitações magnéticas em baixas temperaturas e estrutura da desordem magnética na superfície nestes sistemas sao observados e estudados através de espectroscopia Mössbauer em baixas temperaturas assim como em função do campo magnético até 12 T, assim como susceptibilidade ac e magnetização dc.

"Propriedades Magnéticas de Óxidos YFeO3 e Fe3O4"
Mathur, S. e Lima Jr., E.

Trata-se do estudo sistemático das propriedades magnéticas, estruturais e de transporte em sistemas de nanopartículas e flimes de YFeO3 e Fe3O4 obtidos através de processos sol-gel e deposição química de vapor (CVD). O trabalho visa determinar os efeitos da desordem estrutural nas propriedades magnéticas destes sistemas nanoestruturados. As interações inter-partícula são estudadas através do tipo de comportamento coletivo (arrhenius ou vidro de spin), e os efeitos de desordem superficial na anisotropia magnética resultante. As técnicas utilizadas incluem a espectroscopia Mössbauer, susceptibilidade ac e magnetização dc.

"Estudo Estrutural e Magnético de Filmes Finos de Fe-Pt e Co-Pt"
Souza Neto, N.M. e Santos, A.D.

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

Os filmes são elaborados através da técnica de "magnetron sputtering", a partir de alvos dos elementos puros. Estes filmes foram caracterizados magneticamente através do magnetômetro de amostra vibrante (VSM) e estruturalmente por difração de Raios X. Observamos que existe uma

tendência geral de crescimento dos filmes na direção [111]. Por outro lado, os filmes crescidos sobre o *buffer* de Pt apresentaram maior tamanho de grão. Em relação aos filmes binários de Fe-Pt, estamos expandindo estes estudos. Podemos obter melhores resultados em relação à anisotropia e coercividade se produzirmos amostras ordenadas. Trabalhamos com a estequiometria FePt, com vistas a obter uma estrutura cristalina tetragonal e usamos substratos que possam induzir uma epitaxia conveniente para o ordenamento da estrutura do filme. Este substrato é o de MgO. Desenvolvemos estudos visando a otimização deste ordenamento, em função da espessura do filme de FePt e de um eventual "buffer" de Pt. Estudamos também o efeito da temperatura de deposição e de pós-tratamento térmico sobre o ordenamento cristalino e a anisotropia magnética. Para a análise deste ordenamento estrutural utilizamos as técnicas tradicionais de difração de Raios X, que são complementadas por medidas de EXAFS realizadas no Laboratório Nacional de Luz Sincrotron (LNLS).

"Microscopia Óptico de Varredura em Campo Próximo- Modo Magnetoóptico"
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 substituida 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 construida, não tem sua resolução limitada a $\lambda/2$, como é característico das ondas luminosas propagativas. Ficando portanto, a resolução da imagem, definida pela abertura luminosa da fibra ótica e pelo método de varredura da amostra. Como o objetivo deste projeto é o de estudar materiais magnéticos, foi previsto a inserção de dispositivos de análise de polarização da luz refletida, em termos do efeito Kerr magnetoóptico transversal. Neste modo, 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 construido no LMM, o que lhe dá flexibilidade para o desenvolvimento de novas configurações. Ele utiliza um diodo laser vermelho (λ= 635 nm), fibras óticas monomodo, células foto-multiplicadoras e polarizadores à película. Para a obtenção de uma pequena abertura na fibra ótica, é atacada quimicamente. Assim obtemos um afinamento regular da ponta da fibra. Posteriormente é depositada obliquamente sobre a ponta da fibra, uma camada de Au, de tal maneira que reste uma pequena abertura na extremidade desta. Perfis de difração da luz

na ponta da fibra nos indicam aberturas tipicamente da ordem de centenas de nm. O modo AFM é obtido vibrando-se a fibra por meio de uma 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. O modo magnetoóptico nos permite extrair ciclos de histerese locais na amostra, e imagens de susceptibilidade magnética. Isto demonstra a possibilidade de sensoriar magneticamente a amostra, através do efeito Kerr transversal, mesmo com ondas evanescentes.

"Produção e Caracterização de Nanopartículas Magnéticas por Método Fisico"

Landi, G.T.; Rezende, M.F.A.; Ono Filho, R.I.; Trippe, S.C.; Romero, S.A. e Santos, A.D.

Nanociência e Nanotecnologia se tornaram palavras-chaves para o desenvolvimento científico e tecnológico de qualquer nação. Para a área de magnetismo este fato tem gerado uma certa frustração, pois os métodos frequentemente utilizados para a produção de nanopartículas têm caráter químico. Como estes métodos envolvem meios líquidos aquosos, os seus produtos são constituídos em geral de óxidos. Isto limita fortemente as possibilidades de aplicações magnéticas de nanopartículas. Neste projeto, nos propomos a desenvolver uma metodologia física para a geração de nanopartículas. Como no LMM a principal técnica de preparação de filmes finos é o "magnetron sputtering", estamos desenvolvendo uma metodologia que seja compatível com esta técnica. Isto nos permite a incorporação das nanopartículas em matrizes metálicas ou dielétricas ou então, a inserção de nanopartículas metálicas ou dielétricas em matrizes magnéticas.

Estudos em desenvolvimento:

i) Produção de nanopartículas de Au. As nanopartículas de Au apresentam ressonâncias ópticas conhecidas com plasmons de superfície. Estes plasmons de superfície levam a um forte confinamento da radiação visível em regiões da dimensão das partículas.

ii) Produção de nanopartículas magnéticas em matriz de Au. Filmes finos de Au apresentam igualmente a possibilidade de geração de plasmons de superfície. Portanto a inserção de nanopartículas magnéticas em meios plasmônicos poderão permitir a caracterização individualizada das nanopartículas, via efeitos Kerr magnetoópticos exacerbados pela ressonância plasmon de superfície.

iii) Produção de nanopartículas magnéticas individualizadas.

"Caracterização de Sedimentos Marinhos de Cubatão, São Paulo, por Espectroscopia Mössbauer, PIXE, Susceptibilidade Magnética e RPE: Um Estudo de Magnetismo Ambiental"

Partiti, C.S.M.; Jorge, F.O.; Rossatti, C.E.S.; Tabacniks, M.H.; Pontuschka, W.M.; Mahiques, M.M. (IO-USP); Martins, C.C. (IO-USP) e Figueira, R.C.L. (UCS)

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

"Estudo Biogeoquímico do Ferro e de Metais Pesados em Solos e Sedimentos de Mangues de Clima Tropical e Temperado"
Partiti, C.S.M.; Otero-Pérez, X.L.(Universidade de Santiago de Compostela-Espanha); Vazquez, F.M.(Universidade de Santiago de Compostela-Espanha); Vidal-Torrado, P. (ESALQ-USP) e Ferreira, T.O. (ESALQ-USP)

Os manguezais têm sido utilizados como alternativa de baixo custo para o descarte e o tratamento de esgotos, sejam estes domésticos e/ou industriais. Os contaminantes orgânicos são degradados biológica ou quimicamente, ao contrário dos metais pesados que podem ser acumulados. A presença de óxidos e oxihidróxidos de ferro está relacionada com a distribuição dos metais pesados. Portanto, trabalhos que identifiquem as fases de ferro presentes são de fundamental importância e a Espectroscopia Mössbauer é uma das técnicas utilizadas nesse estudo.

"Horizonte Plácico desenvolvido em Solos de Tabuleiros Costeiros no Nordeste do Brasil"
Partiti, C.S.M.; Jorge, F.O.; Araújo Filho, J.C. (Embrapa) e Varvalho, A.(IGc-USP)

O horizonte plácico é uma camada ferruginosa fina cimentada por ferro ou ferro e manganês podendo conter ou não outros cimentos acessórios. Estudamos três horizontes plácicos desenvolvidos em solos da região dos tabuleiros costeiros do Nordeste do Brasil, amostrados em dois perfis. A dificuldade de se identificar as fases de ferro por difração de raios X, devido à baixa cristalinidade, foi resolvida pela Espectroscopia Mössbauer que identificou as presenças de ferridrita e de goethita com substituição de alumínio.

"Estudo de Vidros Fosfato de Ferro preparados em Fornos de Microondas"
Partiti, C.S.M.; Almeida, F.J.M.(IPEN) e Martinelli, J.R.(IPEN)

Vidros fosfato tem sido estudados por suas interessantes propriedades químicas e são preparados em fornos elétricos, fornos de indução e mais recentemente fornos de microondas. Com a adição de ferro os vidros fosfato tornam-se quimicamente resistentes e há portanto um interesse em se estudar os compostos de ferro formados. A Espectroscopia Mössbauer, a difração de raios X e a análise térmica diferencial são as técnicas utilizadas nesse projeto para caracterização dos compostos de ferro.

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

Murakami, R.K.; Rechenberg, H.R. e Villas-Boas, V. (Universidade de Caxias do Sul)

Fitas amorfas obtidas a partir de ligas com composições $Pr_5Fe_{77-x}Cr_xB_{18}$ (x= 0, 1, 2, 2,5, 3, 4 e 5) foram obtidas via solidificação rápida e posteriormente cristalizadas por meio de um tratamento térmico convencional e por meio de um tratamento no qual passam-se altas correntes pelas fitas ("flash annealing"), resultando em materiais nanocristalinos. A caracterização magnética (medidas de magnetização em função do campo aplicado e em função da temperatura) e estrutural (via difração de raios X) desses materiais foi realizada. A composição que apresentou as melhores propriedades magnéticas foi x= 3 e será estudada em detalhes do ponto de vista magnético (medidas de campo coercivo em função da temperatura, medidas de espectroscopia Mössbauer) e do ponto de vista estrutural (medidas de microscopia eletrônica de transmissão e de varredura, e microscopia de força). O campo coercivo da composição com x=3 é 50% maior do que o campo coercivo da composição análoga com Nd e 40% maior do que a composição com Pr e sem Cr. Um estudo da viscosidade magnética e dos processos reversíveis e irreversíveis na composição otimizada também será realizado.

Laboratório de Novos Materiais e Semicondutores (LNMS-MBE)

Coordenador: Guennadii Michailovich Gusev

"Cruzamento de Níveis de Landau em Sistemas de duas Sub-Bandas Ocupadas"

Duarte, C.A*; Gusev, G.M.*; Quivy, A.A.*; Lamas, T.E.* e Bakarov, A.K.* +

* Instituto de Física da Universidade de São Paulo
+ Institute of Semiconductor Physics, 630090, Rússia

Neste estudo, investigamos a magnetorresistência de dois sistemas diferentes com duas sub-bandas de energia ocupadas: poços quânticos parabólicos e quadrados, ambos de AlGaAs/GaAs. Fizemos séries de

medidas de Shubnikov-de Haas com variação da densidade do gás bidimensional de elétrons n_S e do ângulo de orientação do campo magnético externo *B*.

Estudos anteriores mostraram o aparecimento periódico de estruturas em forma de anel no mapa da magnetorresistividade n_S x *B*, no cruzamento de níveis de diferentes sub-bandas e spins – ou mesmo com forma quadrada. Certos autores levaram em consideração a ocorrência de efeitos de muitos corpos no cruzamento e anticruzamento de níveis de Landau em modelos descritivos para esse fenômeno [1]. Entretanto, foi mostrado que um modelo simples sem o concurso de interações ("*single particle model*") é suficiente para descrever o comportamento observado [2].

Observamos experimentalmente o mesmo comportamento em nossas amostras, e também usamos um modelo sem interações para descrever o fenômeno. A partir disso, estendemos nossos estudos para o caso de mapas de magnetorresistividade com variação do ângulo mantendo n_S constante, isto é, construindo mapas x *B.*

Em nossas medidas, verificamos o aparecimento de picos de magnetorresistência de largura muito menor do que os restantes em cada espectro. Se por um lado a ocorrência de picos de tal natureza foi atribuída em outros sistemas à ocorrência de transição magnética entre estados de Ising no efeito Hall quântico [3], mostramos que as mesmas estruturas podem ser simples conseqüência do cruzamento de níveis de Landau. As diferenças de largura entre os picos resultam da não monotonicidade da energia de Fermi com a variação do campo magnético.

Empregamos o mesmo modelo teórico sem interações, e incluímos algebricamente a dependência com a variação do ângulo de inclinação do campo magnético externo, que para poços parabólicos apresenta solução exata.

Nossos cálculos resultaram em mapas x *B* com grande semelhança com os mapas obtidos experimentalmente, mesmo no caso da amostra de poço quadrado (para a qual a dependência com o ângulo é mais complexa e não apresenta solução algébrica).

Verificamos que os picos de magnetorresistência nos mapas x *B* seguem dois tipos de comportamento: formação de arcos ou linhas oblíquas de inclinação negativa. Essas estruturas aparecem em regiões separadas dos mapas, e seus contornos subentendem a formação de figuras fechadas. No caso dos arcos, surgem figuras semelhantes a losangos, e no caso das linhas oblíquas, surgem anéis. Nossos estudos teóricos revelaram que a formação dos arcos está associada à desocupação da segunda sub-banda de energia. Por outro lado, a formação de cada linha oblíqua está associada à desocupação de um particular nível de Landau da primeira sub-banda.

Referências:
1. Zhang, X.C.; Faulhaber, D.R. e Jiang, H.W., Phys. Rev. Lett. 95, 216801 (2005).

2. Ellenberger, C.; Simovic, B.; Leturq, R.; Ihn, T.; Ulloa, S.E.; Ensslin, K.; Driscoll, D.C. e Gossard, A.C., arXiv: Cond. Matter-0602271 (2006)

3. Muraki, K.; Saku, T. e Hirayama, Y., Phys. Rev. Lett. 87, 196801 (2001); Poortere, E.P.; Tutuk, E.; Papadakis, S.J. e Shayegan, M., Science 290, 1546, (2000).

"Medidas de Campo Magnético Local em um Gás Bidimensional de Elétrons"

Duarte, C.A.*; Gusev, G.M.*; Bakarov, A.K.* [+] e Lamas, T.E.*

* Instituto de Física da Universidade de São Paulo
[+] Institute of Semiconductor Physics, 630090, Rússia

Devido a diversas investigações teóricas e experimentais, recentemente se fez uma reavaliação da classificação dos diferentes tipos de efeito Hall. Por exemplo, previu-se a ocorrência do efeito spin Hall em materiais não magnéticos, como resultado de propriedades inerentes dos materiais, tais como a interação spin-órbita do tipo Rashba, ou o mecanismo da fase de Berry [1], gerando correntes de borda com spins "up" e "down", na ausência de campo magnético externo, sem a formação de acúmulos de carga (como ocorre com o efeito Hall ordinário).

Em nossas investigações, desenhamos uma barra Hall por fotolitografia em uma amostra de poço quântico quadrado de 14 nm de largura, sobre a qual fizemos o *overgrowth* uma camada de GaAs tipo n. Numa segunda fotolitografia, desenhamos mais duas barras Hall pequenas precisamente acima das bordas da barra inferior, as quais empregamos como detectores de carga da barra inferior, possibilitando a medição da magnetização produzida pelo gás de elétrons (da barra inferior) em função do sentido da corrente, da temperatura e de campos magnéticos externos. Essas medidas podem indicar a existência de mecanismos de acumulação de spin eletricamente induzidos em virtude do efeito spin Hall.

Medidas de efeito Hall nas barras superiores possibilitaram a detecção de campos magnéticos pequenos (20mT), na ausência de campos externos, apresentando orientações opostas em bordas opostas, o que é predito pelo efeito spin-Hall. Em acréscimo, o efeito desapareceu com o aumento da temperatura, o que prova que ele não é resultado do efeito de correntes de fuga na amostra. Entretanto, surpreendentemente, esse campo magnético é ordens de magnitude maior do que o esperado como efeito de acúmulo de

spin causado pelo efeito spin Hall (que seria de 0,1 mT). Atribuímos nossos resultados ao efeito de acúmulo de carga (*charge accumulation effect*), o que resulta na pequena depleção da densidade de carga nos detectores Hall e, conseqüentemente, no efeito Hall. Por outro lado, não podemos explicar a assimetria de tal efeito que constatamos com respeito à mudança do sentido da corrente aplicada.

Referência:

1. Inoue, J. e Onho, H., Science 309, 2004 (2005).

"Estudo de Poços Quânticos com Fator g=0"

Maia, A.D.B. e Gusev, G.M.
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Propomos-nos investigar efeitos da composição de Al sobre a polarização de spin e o transporte de elétrons bidimensionais em estruturas $Al_{x,}$ Ga_{x-1} e $As/Al_xGa_{x-1}As$, para o fator g próximo do zero (x=10%). Nossa pesquisa está direcionada a um transistor de spin, uma nova geração de dispositivos eletrônicos baseados no fluxo de spin em adição ao fluxo de carga.

As amostras são crescidas a partir das técnicas de epitaxia de feixe molecular – MBE. Escolhendo como ponto de referência o GaAs e com a percentagem de alumínio no poço de x=10%. A posição da banda de condução da liga $Al_xGa_{1-x}As$ é dada da forma $V(x) = 0{,}693x + 0{,}222x^2$ (eV) [1].

No procedimento do cálculo, escolhemos a concentração de elétrons n_s. Essa concentração é obtida utilizando Medidas Hall e Shubnikov-de Haas. A ocupação dos níveis do poço quântico é determinada por um cálculo autoconsistente. A solução é dada por um conjunto de N autofunções envelope normalizadas ψ_i e autovalores E_i (i= 1,2,3...N) que satisfaçam simultaneamente as equações de Schrödinger e de Poisson unidimensional [2]. Esse cálculo possibilita a determinação do fator g de Landé médio na região do poço e também a determinação do número de sub-bandas ocupadas e suas respectivas concentrações.

O modelo de 5 níveis da teoria k.p [3] nos fornece uma previsão do valor do fator *g* em semicondutores. Para sistemas *bulk*, o fator g previsto é dado por[4]:

$$g_{\vec{k}.\vec{p}} = 2 + C + \frac{2}{3}\left[E_{P0}\left(\frac{1}{\varepsilon_0} - \frac{1}{f_0}\right) + E_{P1}\left(\frac{1}{f_1} - \frac{1}{\varepsilon_1}\right) - \frac{2\Delta\sqrt{E_{P0}E_{P1}}}{3}\left(\frac{2}{\varepsilon_1 f_0} - \frac{1}{\varepsilon_0 f_1}\right)\right]$$

Devemos considerar que o gás de elétrons se estende ao longo da direção z de acordo com a densidade n(z). De modo que:

$$< g_0 >= \frac{\int g_o(z)n(z)dz}{n_s} = \int g_o(z)\,|\psi_i(z)|^2\, dz$$

Aplicando-se o campo elétrico estático na direção z, a densidade eletrônica descola ao longo dessa direção, e o valor de $<g_0>$ muda.

Referências:

1. Adachi, S., J. Appl. Phys. 58, R1 (1985);
2. Rimberg, J. e Westervelt, R.M., Phys. Rev. B 40, 3970 (1989); Sérgio, C.S. op. cit.; Ando, T.; Fowler, A.B. e Stern, F, Rev. Mod. Phys. 54, 437 (1982);
3. Enderlein, R.; Horing, N.J.M., Fundamentals of semiconductor Physics and devices, World Scientific (1997);
4. Pfeffer, P. e Zawadzk, W, Theory of spin splitting in Ga Al As, Phys. Rev B 72, 035325.

"Novos Materiais para Aplicações em Spintrônica, incluindo o Grafeno"

Farfán, A.M.C. e Gusev, G.M.
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Recentemente, o grafeno ou grafite bidimensional, material baseado em carbono, tem apresentado propriedades físicas muito interessantes na área de transporte em sistemas bidimensionais, principalmente na área da spintrônica, o mesmo ocorrendo com outra estrutura semicondutora, os poços quânticos duplos de AlGaAs/GaAs. O foco principal deste projeto é o estudo de ambas essas estruturas e da otimização das condições de seus crescimentos com o intuito de aumentar a mobilidade e o tempo de relaxação dos elétrons, condições essenciais para realçar os efeitos da polarização do *spin* nas propriedades de transporte de elétrons 2D para a aplicação em spintrônica. Outro propósito é o do estudo do ferromagnetismo Hall quântico nestes sistemas.

Para obter o grafeno, estamos partindo de um *bulk* de HOPG o qual foi adquirido com a verba da FAPESP, seguindo cuidadosamente alguns trabalhos que reportam de outros grupos de pesquisa que tem conseguido obter este material, acreditamos que estamos próximos a alcançar este objetivo. Para o qual estamos trabalhando em conjunto com o CCS da UNICAMP e comunicações diretas com o Novoselov, o qual tem conseguido obter o grafeno vide referencias [1,2].

Referências:

1. Novoselov, K.S.; Geim, A.K.; Morozov, S.V.; Jiang, D.; Zhang, Y.; Dubonos, S.V.; Grigorieva, I.V. e Firsov, A.A., Science 306, 666, 2004.
2. Novoselov, K.S.; McCann, E.; Morozov, S.V.; Fal'ko, V.I.; Katsnelson, M.I.; Zeitler, U.; Jiang, D.; Schedin, F. e Geim, A.K., Nature Physics 2, 177, 2006.

"Variação do Coeficiente Hall em Poços Quânticos Parabólicos Largos de $In_{0,31}Ga_{0,69}As$ em Função do Campo Magnético Aplicado"

Marquéz, A.M.O.Z. e Gusev, G.M.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Poços quânticos parabólicos remotamente dopados de AlGaAs, são sistemas amplamente estudados. Neles é possível estudar os efeitos de campos magnéticos altos num gás bi e tridimensional de elétrons. Nesses sistemas os portadores (elétrons ou buracos) são separados fisicamente dos dopantes, com a finalidade de reduzir os efeitos de espalhamento. Cálculos númericos da propriedades eletrônicas desses sistemas a campo zero e com campos magnéticos altos tem mostrado que os termos de Hartree e troca-correlação na equação de Schrodinger são tão importantes quanto o potencial do poço quântico[1,2].

Neste trabalho foram estudadas, através de cálculos analíticos e autoconsistentes, as densidades superficiais de elétrons n_s que podem ser confinadas em poços parabólicos largos (WPQW, *Wide Parabolic Quantum Wells*) com campo magnético zero e campo perpendicular não nulo. Os valores calculados de n_s apresentam uma boa concordância com resultados encontrados na literatura. Desta forma é possível predizer fatores que influenciam na densidade superficial n_s que pode ser contida em um WPQW.

Quando aplicado um campo magnético, observamos que, acima de um campo magnético crítico, a densidade superficial n_s confinada no poço quântico decresce. Acreditamos que esse comportamento está relacionado com a diminuição da largura da distribuição de densidade de carga n(z). Esse fato está em acordo com o resultado de medidas de resistência Hall em WPQWs com campos magnéticos B>3T a temperaturas de 50mK, em poços tipo-n e tipo-p com larguras de 1000A a 4000A.

Referências:

1. Dempsey, J. e Halperin, B.I., Phys. Rev. B 47, 4662 (1993).
2. Hembree, C.; Manson, B.A.; Zhang, A. e Slinkman, J.A., Phys. Rev. B 46, 7588 (1992)

"Transporte em Poços Quânticos Duplos com Fator -G- Nulo"

Armas, L.E.G.*; Gusev, G.M.*; Lamas, T.E. e Bakarov+, A.K.

* Instituto de Física da Universidade de São Paulo
+ Institute of Semiconductor Physics, 630090, Rússia

Nos últimos anos o fenômeno associado ao cruzamento dos níveis de Landau com diferentes orientações do spin, chamado ferromagnetismo de Hall quântico (*Quantum Hall Ferromagnet*, QHF), têm sido estudado intensamente. Em poços quânticos duplos (*Double Quantum Wells*, DQW) o

QHF é descrito em termos do pseudo spin, o qual consiste de: spin real , número quântico orbital e o índice da sub-banda associada. O QHF tem lugar quando o pseudo spin do nível de Landau está completamente alinhado. Quando dois níveis de Landau estão num estado degenerado, a orientação do pseudo spin é determinada pela minimização da energia de Hartree – Fock no estado fundamental. Então, observa-se uma transição ferromagnética no ponto de cruzamento.

Nos DQW, o QHF depende da energia de tunelamento. A interação entre cada poço pode ser controlada pela energia de tunelamento Δ_{SAS}. Quando o valor de Δ_{SAS} é pequeno, o estado fundamental é um estado ferromagnético, no qual o spin do elétron é alinhado ferromagneticamente pela interação entre os elétrons do poço ($|0,\uparrow>$, $|1,\uparrow>$, onde 0 corresponde à função de onda simétrica é 1 à antisimétrica), a direção do spin é fixada pela energia de Zeeman $\Delta_Z = g\mu B$, onde g é o fator de Landé e μ o magnéton de Bohr. Quando Δ_{SAS} tem um valor elevado, apresenta-se uma configuração antiparalela do spin (*parallel pseudospin aligment*), dando origem ao estado *spin- singlet* ($|0,\uparrow>$, $|0,\downarrow>$). Entre estes dois estados a interação entre os poços e de cada poço com ele mesmo, assim como a energia de Zeeman conduz a um novo estado chamado "*canted antiferromagnetic state*" (CAF), no qual os spins têm uma correlação ferromagnética dentro de cada poço e uma correlação antiferromagnética entre eles.

Como a energia de correlação aumenta com a energia de Zeeman, é difícil encontrar as condições quando $\Delta_{SAS} = \Delta_Z$ e CAF estável.

Nossas amostras de estudo são DQW de $Al_xGa1_{1-x}As$ com x = 10%; nesse sistema o fator g de Landé é zero. A energia de separação entre as sub-bandas simétrica e antissimétrica calculada é 0,25 meV. Comparamos nossos resultados com amostras de GaAs onde a energia de tunelamento Δ_{SAS} = 3meV.

Medidas de Shubnikov - de Hass e efeito Hall mostram que o gap de energia em estruturas onde g = 0 é completamente diferente em estruturas de poço quântico duplo. E verificamos que para o fator de preenchimento 6 corresponde à energia de tunelamento ao invés do gap de Zeeman. Também fizemos medidas em campo magnético inclinado e encontramos um comportamento não monotônico no gap do fator de preenchimento 6.

É possível interpretar este comportamento como um estado de CAF, visto que a condição $\Delta_{SAS} = \Delta_Z$ pode ocorrer num certo intervalo de ângulos.

Referência:

1. Zheng, L. et al, Phys.Rev.Lettl, 78, 2453 (1997).

"Pesquisa em Poços-Quânticos Duplos de GaAs e em Campos Magnéticos Baixos"

Mamani*, N.C.; Gusev*, G.M.; Lamas*, T.E. e Bakarov+, A.K.

* Instituto de Física da Universidade de São Paulo
+ Institute of Semiconductor Physics, 630090, Rússia

Poços-quânticos duplos ou sistemas bi-camada consistem de dois poços quânticos paralelos separados por uma barreira de tunelamento. O tunelamento quântico induz a hibridação das sub-bandas de energia e introduz o desdobramento das sub-bandas de energia Δ_{SAS} com valores entre 0.1-1.0 meV. Portanto a superfície de Fermi de um sistema bi-camada é representado por dois círculos concêntricos em campo magnético zero, os quais são deslocados no vetor de onda espacial na presença de campo magnético paralelo. A distorção da superfície de Fermi foram medidas desde o batimento das oscilações de Shubnikov de Haas em campo magnético inclinado.

Observamos oscilações de magneto-resistência em campo magnético baixo em poços-quânticos duplos induzidos pela dispersão de elétrons bidimensionais por fônons acústicos. A posição dos picos de magneto-resistência corresponde à condição de $2K_F u\hbar = \pm(\Delta_{SAS} - \hbar\omega_c)$, onde ω_c é a freqüência do ciclotron, K_F é o vetor de Fermi do elétron e u é a velocidade do som. Resultados para um poço-quântico duplo com largura de barreira 3.1nm num analise FFT das medidas de magneto-resistência mostram um pico em campo magnético perpendicular que continuamente se desenvolve em dois picos em campo magnético inclinado, tal evolução corresponde à transformação da superfície de Fermi e conseqüentemente duas transições eletrônicas devido à absorção e emissão.

Referências:

1. Boebinger, G.S.; Passner, A.; Pfeifer, L.N. e West, K.W., Phys. Rev. B, 43, 12673 (1991).
2. Poortere, E.P.de et al, Shkolnikov, Y.P.; Tutuc, E.; Papadakis, S.J.; Shayegan, M.; Palm, E. e Murphy, T., Appl.Phys. Lett., 80, 1583 (2002).

"Localização fraca e efeitos de interação em heteroestruturas de GaAs/ InGaAs com pontos-quânticos de InAs"

Pagnossin*, I.R.; Meikap, A.K.+; Quivy*, A.A. e Gusev, G.M.*

* Instituto de Física da Universidade de São Paulo
+ National Institute of Technology, Durgapur

Interações elétron-elétron (EEI) e localização fraca (WL, *weak localization*) são fenômenos essenciais à compreensão do transporte eletrônico em estruturas semicondutoras e condutoras mesoscópicas [1,2]. Ambos introduzem correções dependentes da temperatura (*T*) para a condutividade em campo magnético (*B*) nulo, prevista pela teoria clássica de Drude; mas para valores pouco intensos de campo magnético, é a WL que fornece as correções. De fato, sabe-se que a análise da magnetocondutividade através da WL pode fornecer informações valiosas sobre os tempos de relaxação dos elétrons, tais como o tempo de decoerência , o de interação spin-órbita $_{SO}$, *etc*. O primeiro apresenta dependência com a temperatura e é geralmente o de maior interesse, posto que fornece informações acerca das interações entre os elétrons e o mar de Fermi e entre elétrons e fônons.

Neste trabalho nós apresentamos os resultados de um extenso estudo de WL e EEI em sistemas de elétrons bidimensionais em heteroestruturas GaAs/InGaAs com pontos-quânticos de InAs. Medindo a magnetoresistência dessas amostras, nós observamos que em baixas temperaturas e qualquer que seja o estado de evolução dos pontos-quânticos auto-organizados, a condutividade cresce conforme ln(*T*), evidenciando a contribuição conjunta tanto da localização fraca como das interações elétron-elétron. Por outro lado, para $B <$ 5 mT e $T <$ 5 K, a contribuição das EEI para a magnetocondutividade é despresível quando comparada com aquela devido à WL.

Os tempos de espalhamento spin-órbita e de decoerência também foram calculados a partir dos dados obtidos. Observamos que o primeiro não só independe da temperatura como é muito maior que , *ie*, as interações spin-órbita são fracas, o que resulta na magnetocondutividade positiva observada. Além disso, a taxa de coerência *1/* é linearmente proporcional a *T*, o que nos leva a concluir que o processo de decoerência ocorre principalmente através de transferências de pequenas energias via interações elétron-elétron quasi-elásticas [3]. Isto é verdade antes e após a formação dos pontos-quânticos.

Referências:

1. Iordanskii, S.V.; Lyanda-Geller, Y.B.; Pikus, G.E., Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 60, 199 (1994) [JETP Lett. 60, 206 (1994)]: Minkov, G.M.; Germanenko, A.V.; Rut, O.E.; Sherstobitov, A.A.; Golub, L.E.; Zvonkov, B.N. e Willander, M., Phys. Rev. B 70, 155323 (2004).

2. Gornyi, I.V. e Mirlin, A.D., Phys. Rev. Lett. 90, 076801 (2003): Zala, G.; Narozhny, B.N. e Aleiner, I.L., Phys. Rev. B 64, 214204 (2001).

3. Narozhny, B.N.; Zala, G. e Aleiner, I.L., Phys. Rev. B 65, 180202 (2002).

“Estrutura Eletrônica e de Buracos em Nanoestruturas de Semicondutores Magnéticos Diluídos derivados de Materiais III-V, IV e de Nitretos do Grupo-III para aplicações em Spintrônica”

Scolfaro, L.M.R.; Rodrigues, S.C.P. (Universidade Federal Rural de Pernambuco); Sipahi, G.M. (USP-São Carlos); Cunha Lima, I.C. da (Universidade Estadual do Rio de Janeiro) e Silva Jr., E.F. da (Universidade Federal de Pernambuco)

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 nanoestruturas envolvendo semicondutores magnéticos diluídos, isto é, com átomos de metais de transição (MT), tais como GaAs/GaAsMT, GaN/InGaNMT, Si/SiMT, SiGeMT/Si, Si/SiCMT, etc., as quais vêm sendo recentemente bastante estudadas para aplicações em “spintrônica”. Métodos ab initio de cálculos de estrutura eletrônica, como os códigos VASP e FLAPW, são empregados para a obtenção dos parâmetros importantes dos semicondutores hospedeiros. 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 MT. 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 Volume, de Defeitos e Impurezas, de Superfícies e de Crescimento de Nitretos do Grupo III e de suas Nanoestruturas”

Scolfaro, L.M.R.; Teles, L.K. (ITA); Marques, M. (ITA), Lischka, K. (Universidade de Paderborn, Alemanha); Schikora, D. (Universidade de Paderborn, Alemanha); As, D.J. (Universidade de Paderborn, Alemanha); Bechstedt, F. (Universidade de Jena, Alemanha); Furthmüller, J. (Universidade de Jena, Alemanha); Leite Alves, H.W.; (FUNREI) e Alves, J.L.A. (FUNREI)

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

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

Scolfaro, L.M.R.; Marques (ITA), M.; Teles, L.K. (ITA); Bechstedt, F. (Universidade de Jena, Alemanha); Furthmüller, J. (Universidade de Jena, Alemanha) e Ferreira, L.G. (UNICAMP), Leite Alves, H.W. (FUNREI) e Alves, J.L.A. (FUNREI)

Estão sendo estudadas as propriedades estruturais, eletrônicas e termodinâmicas de ligas quaternárias do tipo $In_xAl_{1-x-y}Ga_yN$ (bem como envolvendo arsenetos-InGaAlAs- e fosfetos-InGaAlP) 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 de composição na liga. As propriedades vibracionais são obtidas através do método ABINIT. Diversas quantidades são obtidas: parâmetros de rede, distâncias de ligação, "bulk modulus", diagramas de fase, "gap" de energia, espectro de fônons, etc. As ligas ternárias, sub-produtos das ligas quaternárias, são também analisadas. São investigados os efeitos de separação de fase e de ordenamento nas ligas. Também sistemas envolvendo íons de metais de transição, de potencial aplicação em *spintrônica*, são estudados, tais como: GaMnN, GaCrN, InMnN, InCrN, InFeN, etc.

"Propriedades Estruturais, Eletrônicas, Vibracionais e Dielétricas de Óxidos de Alta Constante Dielétrica (high-k) e de Óxidos dopados com Impurezas de Metal de Transição"
Scolfaro, L.M.R.; Lino, A.T. (Universidade Federal de Uberlândia); Leite Alves, H.W. (FUNREI); Silva Jr., E.F. da (Universidade Federal de Pernambuco) e Rodrigues, S.C.P. (Universidade Federal Rural de Pernambuco)

Estão sendo estudadas as propriedades físicas de óxidos de alta constante dielétrica (high-k) tais como, HfO2, ZrO2, TiO2, LaAlO3, etc. candidatos a substituirem o SiO2 nos dispositivos metal-óxido-semicondutor (MOS). Utilizamos os métodos *ab initio* FLAPW, PAW-VASP e ABINIT para obter: estrutura eletrônica, parâmetros de rede, propriedades óticas em geral, espectros de fônons, etc. Óxidos dopados com íons de metal de transição, que se apresentam como potenciais candidatos para aplicações em spintrônica, vêm também sendo estudados via os métodos *ab initio*.

4.3 Projetos de Pesquisa com Financiamento Externo:

Adalberto Fazzio
Título: "Simulação e Modelagem de Nanoestruturas e Materiais Complexos"
Fonte: Temático (FAPESP Coordenador)
Montante: U$ 134.938,06 + R$ 339.289,42
Período de Vigência: de 1º de agosto de 2006 a 31 de julho de 2010.

Título: “Simulação e Modelagem de Nanoestruturas”
Fonte: CNPq/Rede de Nano (Coordenador)
Montante: R$ 877.834,64
Período de Vigência: de 1º de outubro de 2005 a 30 de setembro de 2009.

Título: “Simulação Computacional Aplicada a Sistemas Nanoestruturados”
Fonte: CAPES/PROCAD
Montante: R$ 250.000,00
Período de Vigência: de 28 de dezembro de 2005 a 27 de dezembro de 2009.

André Bohomoletz Henriques
Título: “Excitons Magnéticos em Calcógenos de Európio”
Fonte: FAPESP
Processo nº: 04/08415-6
Montante: US$ 40,000.00
Período de Vigência: de 1º de dezembro de 2004 a 31 de agosto de 2006.

Antônio Domingues dos Santos
Título: “Estudo Magnetoóptico em Partículas Magnéticas Micro e Nanoscópicas através do MO-SNOM”
Fonte: CNPq - 477717/04-7
Montante:R$ 12.000,00
Período de Vigência: de 2005 a 2007.

Título: “Magnetoóptica Aplicada a Caracterização de Materiais Magnéticos em Escala Microscópica”
Fonte: CNPq/CNRS
Montante: R$ 8.100,00
Período de Vigência: de 2005 a 2006.

Antônio José Roque da Silva
Vice-Coordenador do Projeto
Coordenador: Adalberto Fazzio
Título: “Simulação e Modelagem de Nanoestruturas”
Fonte: CNPq/Rede de Nano
Montante: R$ 877.834,64
Período de Vigência: de 1º de outubro de 2005 a 30 de setembro de 2009.

Pesquisador Principal do Projeto
Coordenador: Adalberto Fazzio
Título: “Simulação e Modelagem de Nanoestruturas e Materiais Complexos”
Fonte: FAPESP/Projeto Temático
Montante: U$ 134.938,06 + R$ 339.289,42
Período de Vigência: de 1º de agosto de 2006 a 31 de julho de 2010.

Daniel Reinaldo Cornejo

Título: “Propriedades Magnéticas de Nanofios obtidos por Eletrodeposição AC”
Fonte: FAPESP
Processo nº: 05/00931-8
Montante: R$ 18.750,00 + US$ 34,588.00
Período de Vigência: de 2005 a 2007.

Título: “Propriedades Magnéticas de Nanofios obtidos por Eletrodeposição AC”
Fonte: CNPq
Montante: R$ 5.000,00
Período de Vigência: de 2005 a 2006.

Guennadii Michailovich Gusev
Título: “Crescimento, Propriedades Estruturais, Óticas e de Transporte de Nanoestruturas Semicondutoras derivadas de Compostos III-V”.
Fonte: CNPq-PRONEX (Coordenador)
Montante: R$ 606.000,00
Período de Vigência: de 2000 a 2006.

Título: “Estudo da interação de spin eletrônica nuclear em nanoestruturas semicondutoras: objetivo, dispositivos de memória para spintrônica”
Fonte: CNPq/NSF Edital 020/2004 – University of Florida (Brasil/EUA) (Coordenador)
Processo nº: 490505/2004-0
Valor: R$38.000,00
Período de Vigência: de 23 de maio de 2005 a 23 de maio de 2007.

Título: “Crescimento Epitaxial de Novos Materiais para Dispositivos Spintronicos”
Fonte: FAPESP-Regular
Processo nº 2005/03998-6
Valor: R$ 63.288,04
Período de Vigência:: de 1º de fevereiro de 2006 a 31 de janeiro de 2008.

Helena Maria Petrilli
Título: “Propriedades Estructurales y Electrónicas em Sistemas de Potencial Interes Tecnológico”
Fonte: Convênio de Cooperação Bilateral (CAPES/SECYT - Argentina)
Montante: R$ 4.800,00 + R$ 9.600,00
Período de Vigência: de 2005 a 2006.

Participante do Projeto
Institutos do Milênio - PADCT III
Título: “Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos”
Coordenadora: Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas
Fonte: CNPq
Período de Vigência: 2005 a 2008.

Hercílio Rodolfo Rechenberg
"Hidrogênio em Compostos Intermetálicos: Magnetismo e Difusão"
Fonte: FAPESP
Processo nº: 04/10082-5
Montante: R$ 16.852,00 + US$ 25,040.10
Período de Vigência: de dezembro de 2004 a agosto de 2007.

Título: "Estudo das Perdas Magnéticas em Ferrofluídos Biocompatíveis com Aplicação em Hipertermia Magnética"
Fonte: FAPESP
Processo nº: 04/09066-5
Montante: R$ 59.206,23
Período de Vigência: de 1º de abril de 2005 a 31 de março de 2007.

Participante do Projeto
Instituto do Milênio de Fluidos Complexos
Coordenador: Antônio Martins Figueiredo Neto
Fonte: CNPq
Montante: R$ 3.000.000,00
Período de Vigência:de 1º de outubro de 2005 a 30 de setembro de 2008.

Lucy Vitória Credidio Assali
Participante do Projeto
Apoio a Projetos de Pesquisa Científica
Título: "Nonosensores Integrados e Microssistemas"
Coordenador: Prof. Dr. Francisco Javier Ramirez Fernandez
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, Departamento de Engenharia de Sistemas Eletrônicos
Fonte: CNPq
Montante: R$ 30.000,00
Período de Vigência: de 08 de novembro de 2004 a 07 de novembro de 2006.
Projeto de Pesquisa Científica
Título: "Diamondoids: modelagem de diamante molecular para aplicações específicas em nanotecnologia"
Fonte: CNPq
Montante: R$ 8.500,00
Período de Vigência: de 13 de julho de 2005 a 12 de julho de 2007.

Participante do Projeto
Projeto de Pesquisa Científica
Título: "Nanofios de Silício: Propriedades Eletrônicas e Estruturais"
Coordenador: Prof. Dr. João Francisco Justo Neto
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, Departamento de Engenharia de Sistemas Eletrônicos
Fonte - CNPq (Edital N° 02/2006 - Projeto Universal)
Montante: R$ 21.000,00
Período da Vigência: 2006 a 2008

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro
Título: "Filmes Epitaxiais Ferromagnéticos de GaN para aplicações em Spintrônica"
Fonte: CAPES - DAAD/Probal (Brasil/Alemanha)
Montante: R$ 47.119,00
Período da Vigência: de 2004 a 2006.

Título: "Nanoestruturas Semicondutoras baseadas em Nitretos e Óxidos Semicondutores dopados com Metais de Transição para Aplicação em Spintrônica"
Comitê de Assessoramento: FA-Física e Astronomia
Fonte: CNPq/UNIVERSAL
Montante: R$29.260,00
Período de vigência: de 2006 a 2008.

Maria Cristina dos Santos
Participante do Projeto
Título: "Simulação e Modelagem de Nanoestruturas"
Coordenador: Adalberto Fazzio
Fonte: CNPq/Rede de Nano
Montante: R$ 877.834,64
Período de Vigência: de 1º de outubro de 2005 a 30 de setembro de 2009.

Participante do Projeto
Título: "Materiais Nanoestruturados" - PUC-RJ
Coordenador: Prof. Dr. Fernando Lázaro Freire Jr.
Fonte: CNPq - Redes Cooperativas Integradas de Pesquisa Básica e Aplicada em Nanociência, Nanotecnologia e Nanobiotecnologia
Montante: R$ 3.500.000,00
Período de Vigência: de 22 de dezembro de 2005 a 21 de dezembro de 2007.

Participante do Projeto
Título: "Pesquisa e Desenvolvimento de Novos Materiais de Interesses em Nanotecnologia: Aplicações na Indústria (micro-) eletrônica e metal-mecânica"
Coordenador: Fernando Alvarez
Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas
Fonte: TEMÁTICO FAPESP - Vice-Coordenadora
Montante: R$ 677.756,14 e US$ 605.456,95
Período de Vigência: de 1º de junho de 2006 a 31 de maio de 2010.

Marília Junqueira Caldas
Título:" "Estudo Teórico Multi-Escala de Nanoestruturas Puras e Híbridas"
Fonte: TEMÁTICO FAPESP - Coordenadora
Montante: R$ 117.110,54 + US$ 85.000,00
Período de Vigência: de 1º de outubro de 2005 a 30 de setembro de 2009.

Participante do Projeto
Institutos do Milênio - PADCT III

Título: “Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos”
Coordenadora: Profa. Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas
Fonte: CNPq
Período de Vigência: de 2005 a 2008.

Projeto Universal
Coordenadora
Título: “Estudo Teórico de Interfaces e Montagens Orgânico-Inorgânico”
Fonte: CNPq
Montante: R$ 15.000,00
Período de Vigência: de 11 de agosto de 2005 a 10 de agosto de 2007.

Participante do Projeto
Título: “Simulação e Modelagem de Nanoestruturas”
Coordenador: Adalberto Fazzio
Fonte: CNPq/Rede de Nano
Montante: R$ 877.834,64
Período de Vigência: de 1º de outubro de 2005 a 30 de setembro de 2009.

Participante do Projeto
Título: “Instituto de Nanociências”
Coordenadora: Belita Koiler
Universidade Federal do Rio de Janeiro
Fonte: CNPq
Período de Vigência: de 2005 a 2008.

Nei Fernandes de Oliveira Jr.
Título: “Pesquisa em Semicondutores em Baixas Temperaturas e Campos Magnéticos Intensos”
Fonte: TEMÁTICO FAPESP (Coordenador)
Montante: R$ 887.536,74 + US$ 896.290,50
Período de Vigência: de junho de 2000 a outubro de 2007.

Título: “Nanoestruturas de Semicondutores Magnéticos Diluídos de Gap Estreito para aplicações na Spintronica”
Fonte: FAPESP/CNRS
Montante: R$ 37.650,00
Período de Vigência: 1º de maio de 2006 a 30 de abril de 2009.

Renato de Figueiredo Jardim
Título: “Estudos de Fenômenos Intergranulares em Óxidos Cerâmicos”
Fonte: TEMÁTICO FAPESP (R. Muccillo (IPEN), R.F. Jardim (IFUSP) e D. Gouvêa (EPUSP)
Processo nº: 05/53241-9
Montante: R$ 410.000,00 + US$ 149,173.15
Período da Vigência: de 1º de junho de 2005 a 31 de maio de 2010.

Sylvio Roberto Accioly Canuto
Título: “Estudos Teóricos de Propriedades Eletrônicas e Estruturais de Moléculas, Efeitos de Solventes e Fenômenos Quânticos em Biomoléculas”
Fonte: TEMÁTICO FAPESP (Coordenador)
Processo nº: 02/01457-0

Montante: R$ 252.170,55
Período de Vigência: de 1º de março de 2003 a 28 de junho de 2006.

Título: "Rede de Informática para Apoio à Pesquisa em Ciência dos Materiais"
Fonte: Programa de Equipamentos Multiusuários FAPESP (Coordenador)
Processo nº: 04/08855-6
Montante: Outras Verbas R$ 51.506,00
Material Permanente R$ 83.493,69
Período de Vigência: de 1º de julho de 2005 a 30 de junho de 2007.

Título: "Estudo de Propriedades Elétricas e Ópticas de Moléculas em Meio Líquido"
Fonte: CAPES/PROCAD
Montante: R$ 124.643,20
Período de Vigência: 29 de dezembro de 2005 a 28 de dezembro de 2009.

4.4 Estágios, Visitas Científicas e Outros:

Adalberto Fazzio
Participar de reunião no CBPF - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, sobre a conclusão do Relatório do Centro de Gestão e Estudos Estratégicos.
Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
Período do afastamento: de 09 a 14 de fevereiro de 2006.

Visita de colaboração científica.
Grupo de pesquisa do Prof. Dr. Paulo César Piquini.
Departamento de Física da Universidade Federal de Santa Maria.
Santa Maria, Rio Grande do Sul.
Período do afastamento: de 11a 18 de abril de 2006.

Participar de reunião com o Ministro da Ciência e Tecnologia.
MCT - Ministério da Ciência e Tecnologia.
Brasília, Distrito Federal.
Período do afastamento: de 19 a 20 de abril de 2006.

Participar do Encontro Anual de Acadêmicos.
Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
Período do afastamento: de 04 a 07 de junho de 2006.

Participar de uma reunião com a IUPAP - International Union of Pure and Applied Physics. Vienna, na Áustria.
Período do afastamento: de 22 a 31 de julho de 2006.

Participar de uma reunião com o Presidente da República, Luiz Inácio Lula da Silva, sobre 'Política Científica'.
Brasília, Distrito Federal.
Período do afastamento: de 06 a 09 de agosto de 2006.

Participar de uma reunião com a Comissão de Estudos da Física, a convite do Prof. Dr. José Fernandes de Lima, Diretor de Programas CAPES/MEC.
Brasília, Distrito Federal.
Período do afastamento: de 31 de agosto a 1º de setembro de 2006.

Participar da Cerimônia de Premiação do Programa L'Oréal para Mulheres Brasileiras na Ciência.
Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
Período do afastamento: de 25 a 26 de setembro de 2006.

Participar da Reunião da Rede de Teoria Theo-Nano, do I Encontro do Instituto do Milênio de Nanotecnologia e do I Encontro da Rede Nacional de Pesquisa em Nanotubos de Carbono, Projeto CNPq.
Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
Período do afastamento: de 18 a 22 de novembro de 2006.

Visita de colaboração científica.
Grupo de pesquisa do Prof. Dr. Luiz Eduardo Oliveira.
Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas.
Campinas, São Paulo.
Período do afastamento: de 28 a 29 de novembro de 2006.

Participar da solenidade comemorativa do 50º Aniversário da Comissão Nacional de Energia Nuclear/CNEN.
Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
Período do afastamento: de 30 de novembro a 1º de dezembro de 2006.

Visita de colaboração científica.
Grupo de pesquisa do Prof. Dr. Rogério Baierle.
Departamento de Física da Universidade Federal de Santa Maria.
Santa Maria, Rio Grande do Sul.
Período do afastamento: de 10 a 16 de dezembro de 2006.

André Bohomoletz Henriques
Visita de colaboração científica.
INPE - Instituto Nacional de Pesquisa Espaciais.
São José dos Campos, São Paulo.
Data do afastamento: de 10 de outubro de 2006.

Antônio Domingues dos Santos
Visita de colaboração científica.
Laboratoire Louis Néel - CNRS, Grenoble, França.
Período do afastamento: de 18 de janeiro a 08 de fevereiro de 2006.

Participar do Encontro de Avaliação da Qualidade de Aços para fins Eletromagnéticos, no INMETRO de Xerém.

Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
Período do afastamento: de 11 a 12 de julho de 2006.

Visita de colaboração científica.
Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas.
Campinas, São Paulo.
Data do afastamento: 23 de novembro de 2006.

Antônio José Roque da Silva
Visitas de colaboração científica.
Trinity College.
Dublin, Irlanda.

University of Cambridge.
Cambridge, Reino Unido.
Período do afastamento: de 19 a 29 de outubro de 2006.

Visita de colaboração científica.
Grupo de pesquisa do Prof. Dr. James R. Chelikowsky.
Universidade do Texas
Austin, Estados Unidos.
Período do afastamento: de 11 a 22 de março de 2006.

Visita de colaboração científica.
Grupo de pesquisa dos Profs. Drs. Nicolas Agrait de la Puente e Fernando Flores.
Universidade Autônoma de Madrid.
Madrid, Espanha.
Período do afastamento: de 02 a 21 de setembro de 2006.

Visitas de colaboração científica.
Grupo de pesquisa dos Drs. Mauro Ferreira e Stefano Sanvito.
Trinity College.
Dublin, Irlanda.

University of Cambridge.
Cambridge, Reino Unido.
Período do afastamento: de 19 a 29 de outubro de 2006.

Participar da Reunião "Estudo Prospectivo sobre Materiais", no Centro de Gestão e Estudos Estratégicos.
Brasília, Distrito Federal.
Período do afastamento: de 07 a 08 de novembro de 2006.

Participar da Reunião da Rede de Teoria Theo-Nano, do I Encontro do Instituto do Milênio de Nanotecnologia e do I Encontro da Rede Nacional de Pesquisa em Nanotubos de Carbono, Projeto CNPq.

Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
Período do afastamento: de 19 a 22 de novembro de 2006.

Carmen Silvia de Moya Partiti
Participar do Comitê Local da 10th Latin American Conference on the Applications of Mössbauer Effect - LACAME'2006, organizada pelo Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, bem como apresentar uma palestra convidada.
Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
Período do afastamento: de 05 a 09 de novembro de 2006.

Gerardo Fabián Goya
Estágio de Pós-Doutoramento.
Instituto de Nanociência de Aragón (INA).
Zaragoza, Espanha.
Período do afastamento: de 15 de junho de 2005 a 14 de junho de 2006.

Prosseguimento ao Estágio de Pós-Doutoramento.
Instituto de Nanociência de Aragón (INA).
Zaragoza, Espanha.
Período do afastamento: de 15 de junho de 2006 a 14 de junho de 2007.

Guennadii Michailovich Gusev
Visita de colaboração científica.
High Magnetic Field Laboratory
Grenoble, França.
Período do afastamento: de 08 de janeiro a 13 de fevereiro de 2006.

Visita de colaboração científica.
High Magnetic Field Laboratory da Universidade da Flórida.
Flórida, Estados Unidos.
Período do afastamento: de 22 de junho a 06 de julho de 2006.

Helena Maria Petrilli
Visita de colaboração científica.
Grupo de pesquisa do Prof. Dr. Douglas Soares Galvão.
Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas.
Campinas, São Paulo.
Data do afastamento: 08 de março de 2006.

5º Encontro de Trabalho do Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos"
Atibaia, São Paulo.
Período do afastamento: de 09 a 13 de abril de 2006.

Participar da Reunião do Comitê Internacional do Programa da XIV International Conference on Hyperfine Interactions (HFI 2007).

Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
Período do afastamento: de 10 a 13 de novembro de 2006.

Hercílio Rodolfo Rechenberg.
Participar da Reunião do Comitê Organizador do VIII Latin American Workshop on Magnetism, Magnetic Materials and their Applications.
CBPF - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas.
Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
Data do afastamento: 05 de outubro de 2006.

Lucy Vitória Credidio Assali
Visita ao Centro de Tecnologia Mecânica e Automação do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Aveiro.
Aveiro, Portugal.
Período do afastamento: de 1º a 14 de setembro de 2006.

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro
Visita de colaboração científica.
Grupo de Física de Materiais e Dispositivos Semicondutores do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE, a convite do Prof. Dr. Eronides Felisberto da Silva.
Período do afastamento: de 15 de janeiro a 13 de julho de 2006.

Prosseguimento à visita de colaboração científica.
Grupo de Física de Materiais e Dispositivos Semicondutores do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE, a convite do Prof. Dr. Eronides Felisberto da Silva.
Período do afastamento: de 14 de julho de 2006 a 15 de janeiro de 2007.

Visita de colaboração científica.
Grupo de pesquisa do Prof. Dr. K. Lischka.
Laboratório de Optoeletrônica da Universidade de Paderborn.
Paderborn, Alemanha.
Período do afastamento: de 11 a 30 de outubro de 2006.

Maria Cristina dos Santos
Visita de colaboração científica.
Grupo de pesquisa do Prof. Dr. Fernando Alvarez.
Instituto de Física “Gleb Wataghin” da Universidade Estadual de Campinas.
Campinas, São Paulo.
Datas dos afastamentos: 19 de maio e 05 de setembro de 2006.

Participar de uma reunião de trabalho relativa ao Projeto de Redes Cooperativas Integradas de Pesquisa Aplicada em Nanociência, Nanotecnologia e Nanobiotecnologia, CNPq.
Brasília, Distrito Federal.
Período do afastamento: de 28 a 30 de setembro de 2006.

Participar do Encontro da Rede de Teoria (Theo-Nano), Projeto CNPq.
Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
Período do afastamento: de 19 a 20 de novembro de 2006.

Marília Junqueira Caldas
Visitas de colaboração científica.
Grupo de pesquisa da Profa. Dra. Elisa Molinari.
INFM - National Research Center on nanoStructures and bioSystems at Surfaces (S3), Universidade de Modena, Departamento de Física, Modena, Itália.
Períodos dos afastamentos: (a) de 11 de janeiro a 15 de fevereiro de 2006; (b) de 20 de maio a 1º de junho de 2006; (c) de 20 de julho a 03 de agosto de 2006; (d) de 29 de setembro a 16 de outubro de 2006.

5º Encontro de Trabalho do Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos"
Atibaia, São Paulo.
Período do afastamento: de 09 a 13 de abril de 2006.

Participar da Reunião da Rede de Teoria Theo-Nano, do I Encontro do Instituto do Milênio de Nanociências, Projeto CNPq.
Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
Período do afastamento: de 18 a 21 de novembro de 2006.

Nei Fernandes de Oliveira Jr.
Visitas de colaboração científica.

Empresa Cryogenic Limited, Londres, Inglaterra.

Grupo de pesquisa do Prof. Dr. Giorgio Frossati.
Leiden University, Holanda.

Grupo de pesquisa do Prof. Dr. Guenter Bauer
Linz University, Áustria.

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

Período do afastamento: 1º a 30 de janeiro de 2006.

Visita de colaboração científica.
Grupo de pesquisa do Prof. Dr. Paschoal José.
Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas.
Campinas, São Paulo.
Data do afastamento: 16 de março de 2006.

Participar da Reunião da Comissão Avaliadora do PIBIC/FACEP/CNPq 2006, organizada pela FACEPE - Fundação de Amparo à Ciência e Tecnologia do Estado de Pernambuco.
Recife, Pernambuco.
Período do afastamento: 24 a 26 de abril de 2006.

Renato de Figueiredo Jardim
Visita de colaboração científica.
Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas.
Campinas, São Paulo.
Data do afastamento: 15 de agosto de 2006.

Visita de colaboração científica.
Comissión Nacional de Energia Atômica, Centro Atômico Constituyentes, Departamento de Física.
San Martin, Argentina.
Período do afastamento: de 02 a 08 de setembro de 2006.

Visita de colaboração científica.
Grupo de pesquisa da Profa. Dra. Márcia Gallas.
Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Su..
Porto Alegre, Rio Grande do Sul.
Período do afastamento: de 24 a 25 de outubro de 2006.

Participar do julgamento do Edital 43/2006 - "Seleção Pública de Propostas para Apoio a Projetos de Melhoria de Infra-Estrutura Laboratorial em Nanotecnologia, no CNPq.
Brasília, Distrito Federal.
Período do afastamento: de 10 a 13 de dezembro de 2006.

Sylvio Roberto Accioly Canuto
Visita de colaboração científica.
Grupo de pesquisa do Prof. Dr. Roberto Rivelino de Melo Moreno.
Universidade Federal da Bahia, Departamento de Física do Estado Sólido.
Salvador, Bahia.
Períodos dos afastamentos: de 17 a 30 de janeiro de 2006; de 15 a 23 de novembro de 2006.
Visita de colaboração científica.
Grupo de pesquisa do Prof. Dr. Benedito José Costa Cabral.
Universidade de Lisboa.
Lisboa, Portugal.
Período do afastamento: de 18 a 26 de julho de 2006.

Visitar, a convite da CAPES, o Programa de Pós-Graduação das seguintes instituições: (1) Fundação Universidade do Vale do São Francisco, Campus Petrolina, PE; (2) Universidade Federal de Campina Grande, PE
Período do afastamento: de 22 a 28 de agosto de 2006.

Participar da Avaliação Externa do Consórcio CEDERJ (Centro de Educação Superior a Distância do Estado do Rio de Janeiro).
Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
Período do afastamento: de 20 a 23 de setembro de 2006.

Visita de colaboração científica.
Grupo de pesquisa do Prof. Dr. Marcos Antônio de Castro.
Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás.
Goiânia, Goiás.
Período do afastamento: de 17 a 21 de dezembro de 2006.

Valdir Bindilatti
Visita de colaboração científica.
INPE - Instituto Nacional de Pesquisa Espaciais.
São José dos Campos, São Paulo.
Período do afastamento: de 04 a 09 de dezembro de 2006.

4.5 Participação em Reuniões Científicas Internacionais:

Adalberto Fazzio
APS March Meeting 2006.
Baltimore, Maryland, Estados Unidos.
Período do afastamento: de 11 a 21 de março de 2006.

209th Electrochemical Society Meeting.
Denver, Colorado, Estados Unidos.
Período do afastamento: de 06 a 14 de maio de 2006.

28th International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS
Vienna, Áustria.
Período do afastamento: de 22 a 31 de julho de 2006.

24th European Conference on Surface Science - ECOSS-24.
Paris, França.
Período do afastamento: de 02 a 10 de setembro de 2006.

André Bohomoletz Henriques
28th International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS.
Vienna, Áustria.

17th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics - SEMIMAG-17.
Wurzburg, Alemanha.
Período do afastamento: de 22 de julho a 04 de agosto de 2006.

Antônio José Roque da Silva
APS March Meeting 2006.
Baltimore, Maryland, Estados Unidos.
Período do afastamento: de 11 a 22 de março de 2006.

E-MRS Spring Meeting.
Nice, França.
Período do afastamento: de 26 de maio a 03 de junho de 2006.

10th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure.
Foz do Iguaçú, Paraná.
Período do afastamento: de 27 a 30 de agosto de 2006.

24th European Conference on Surface Science - ECOSS-24.
Paris, França.
CECAM - Catalysis from First Principles.
Lyon, França.
Período do afastamento: de 02 a 21 de setembro de 2006.

Workshop Simulations of Novel Carbon Materials.
Lyon, França.
Período do afastamento: de 19 a 29 de outubro de 2006.

Armando Corbani Ferraz
International Conference on NANO-Structures Self-Assembling.
Aix-en-Provence, França.
Período do afastamento: de 1º a 09 de julho de 2006.

Carmen Silvia de Moya Partiti
10th Latin American Conference on the Applications of Mössbauer Effect - LACAME'2006, organizada pelo Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas.
Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
Período do afastamento: de 05 a 09 de novembro de 2006.

Daniel Reinaldo Cornejo
3rd Joint European Magnetic Symposia.
San Sebastian, Espanha.
Período do afastamento: de 24 de junho a 02 de julho de 2006.

Guennadii Michailovich Gusev
28th International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS.
Vienna, Áustria.

17th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics - SEMIMAG-17.
Wurzburg, Alemanha.
Período do afastamento: de 22 de julho a 06 de agosto de 2006.

Hercílio Rodolfo Rechenberg
3rd Joint European Magnetic Symposia.
San Sebastian, Espanha.
Período do afastamento: de 24 de junho a 03 de julho de 2006.

International Conference on Magnetism - ICM'2006.
Kyoto, Japão.
Período do afastamento: de 17 a 27 de agosto de 2006.

10th Latin American Conference on the Applications of Mössbauer Effect - LACAME'2006, organizada pelo Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas.
Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
Período do afastamento: de 06 a 08 de novembro de 2006.

Lucy Vitória Credidio Assali
17th European Conference on Diamond, Diamond-Like Materials, Carbon Nanutubes, Nitrides & Silicon Carbide.
Estoril, Portugal.
Período do afastamento: de 1º a 14 de setembro de 2006.

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro
International Workshop on Nitride Semiconductors - 2006 (IWN-2006).
Kyoto, Japão.
Período do afastamento: de 10 a 30 de outubro de 2006.

Maria Cristina dos Santos
International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals – ICSM2006.
Dublin, Irlanda.
Período do afastamento: de 1º a 09 de julho de 2006.

Marília Junqueira Caldas
3rd International Conference on Nanoscience and Nanotechnology.
Trieste, Itália.
Período do afastamento: de 20 de maio a 1º de junho de 2006.

28th International Conference on the Physics of Semiconductors - ICPS.
Vienna, Áustria.
Período do afastamento: de 20 de julho a 03 de agosto de 2006.

Sylvio Roberto Accioly Canuto
4th International Meeting on Photodynamics.
Havana, Cuba.
Período do afastamento: 04 a 14 de fevereiro de 2006.

3rd International Conference on Hydrogen Bonding and Molecular Interactions.
Kiew, Ucrânia.
Período do afastamento: de 12 a 23 de maio de 2006.

Workshop Mathematics in Chemistry.
Lisboa, Portugal.
Período do afastamento: de 18 a 26 de julho de 2006.

3rd International Conference on Computational Methods and Engineering (ICCMSE 2006).
Creta, Grécia.
Período do afastamento: de 25 de outubro a 03 de novembro de 2006.

4.6 Participação em Reuniões Científicas Nacionais:

Adalberto Fazzio
58ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira para o Progresso da Ciência.
Florianópolis, Santa Catarina.
Período do afastamento: de 16 a 20 de julho de 2006.
X Encontro Nacional IFNOPAP, organizado pela Universidade Federal do Pará.
Belém, Pará.
Período do afastamento: de 16 a 20 de agosto de 2006.

II Semana de Física da UESC, organizada pela Universidade Estadual de Santa Cruz.
Ilhéus, Bahia.
Período do afastamento: de 26 a 28 de outubro de 2006.

André Bohomoletz Henriques
XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
São Lourenço, Minas Gerais.
Período do afastamento: de 09 a 13 de maio de 2006.

Antônio Domingues dos Santos
XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
São Lourenço, Minas Gerais.
Período do afastamento: de 09 a 13 de maio de 2006.

V Encontro da Sociedade Brasileira de Pesquisas em Materiais (SBPMat).
Florianópolis, Santa Catarina.
Período do afastamento: de 08 a 12 de outubro de 2006.

Antônio José Roque da Silva
XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

São Lourenço, Minas Gerais.
Período do afastamento: de 09 a 13 de maio de 2006.

Workshop Cáculo de Primeiro Princípio de Transporte em Nanoestruturas, organizado pelo Centro Internacional de Física da Matéria Condensada, Universidade Brasília.
Brasília, Distrito Federal.
Período do afastamento: de 12 a 14 de dezembro de 2006.

Daniel Reinaldo Cornejo
XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
São Lourenço, Minas Gerais.
Período do afastamento: de 09 a 13 de maio de 2006.

Helena Maria Petrilli
V Encontro da Sociedade Brasileira de Pesquisas em Materiais (SBPMat).
Florianópolis, Santa Catarina.
Período do afastamento: de 07 a 13 de outubro de 2006.

Hercílio Rodolfo Rechenberg
XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
São Lourenço, Minas Gerais.
Período do afastamento: de 09 a 13 de maio de 2006.

Luísa Maria Ribeiro Scolfaro
II Encontro da Rede Cooperativa de Materiais Nanoestruturados, REMAN.
Salvador, Bahia.
Período do encontro: de 23 a 25 de março de 2006.

Marília Junqueira Caldas
5º Encontro de Trabalho do Instituto Multidisciplinar de Materiais Poliméricos”
Atibaia, São Paulo.
Período do afastamento: de 09 a 13 de abril de 2006.

Nei Fernandes de Oliveira Jr.
II Semana de Física da Universidade Federal de São Carlos.
São Carlos, São Paulo.
Data do afastamento: 06 de abril de 2006.

XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
São Lourenço, Minas Gerais.
Período do afastamento: de 09 a 13 de maio de 2006.

Sylvio Roberto Accioly Canuto
XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.
São Lourenço, Minas Gerais.

Período do afastamento: de 09 a 11 de maio de 2006.

IV Workshop em Física Molecular e Espectroscopia.
Salvador, Bahia.
Período do afastamento: de 15 a 23 de novembro de 2006.

4.7 Prêmios e Outras Distinções:

Adalberto Fazzio

Eleito *Fellow* of the Institute of Physics (IoP). Um membro *Fellow* tem as seguintes características: "This senior class of membership indicates a very high level of achievement in physics and an outstanding contribution to the profession".

- julho de 2006

Condecorado com a insígnia da **Ordem Nacional do Mérito Científico.**

A Cerimônia foi presidida pelo Excelentíssimo Senhor Presidente da República, Luis Inácio Lula da Silva, no Palácio do Planalto, em Brasília, no Distrito Federal.

- agosto de 2006

Renato de Figueiredo Jardim

Em uma série de trabalhos científicos publicados, desenvolvidos no Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas - LESBT, pesquisadores do Grupo de Transições de Fase e Supercondutividade, Dr. Pedro Muñe Bandera (ex-pós-doutorando), Dr. Ernesto Govea-Alcaide (pós-doutorando) e o Prof. Dr. Renato de Figueiredo Jardim, investigaram experimentalmente e teoricamente as propriedades das *regiões intragranulares em cerâmicas supercondutoras*. Os resultados relevantes obtidos pelos pesquisadores para o entendimento dessas propriedades foram agraciados com o Prêmio de melhor contribuição ao desenvolvimento científico do ano de 2005, pela Academia de Ciências de Cuba, bem como pela Província de Oriente, em Santiago de Cuba.

- fevereiro de 2006

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Recebimento de uma comenda, das mãos do Magnífico Reitor do Instituto Superior de Ciências e Tecnologia Nucleares de La Havana, Prof. Dr. Fernando Guzmán, em reconhecimento à sua prolífera trajetória na atividade

acadêmica e investigação científica, A referida comenda também confere a categoria docente especial de *Profesor Invitado*, de validade nacional, reconhecida pelo Ministério de Ciências, Tecnologia e Meio Ambiente e é um alto reconhecimento dos professores e pesquisadores ao seu trabalho no desenvolvimento da ciência e à participação na formação de especialistas cubanos.

- março de 2006

5 PRODUÇÃO CIENTÍFICA

5.1 Trabalhos Apresentados em Eventos Internacionais:

1. AMORIM, R.G.; NOVAES, F.D.; ANTONELLI, A.; FAZZIO, A. and SILVA, A.J.R. da - "Double Vacancies and Charge Transport in Carbon Nanotubes". In: *24th European Conference on Surface Science - ECOSS-24,* Paris, França, September 4-8 (2006).

2. AMORIM, R.G.; SILVA, A.J.R. da; FAZZIO, A. and ANTONELLI, A. - "Defects in Carbon Nanotubes". In: *APS March Meeting 2006*, Baltimore, Maryland, Estados Unidos, March 13-17 (2006).

3. ARANTES, J.T.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "First Principles Study of the Ge:Mn and GaAs:Mn Nanowires". In: *24th European Conference on Surface Science - ECOSS-24,* Paris, França, September 4-8 (2006).

4. ARAÚJO Filho, J.C.; CARVALHO, A.; JORGE, F.O. and PARTITI, C.S.M. - "Placic Horizons in Soils of Coastal Tablelands in the Northeastern Region of Brazil". In: 10th *Latin American Conference on the Applications of Mössbauer Effect - LACAME 2006*, Rio de Janeiro, RJ, November 5-9 (2006).

5. ASSALI, L.V.C.; JUSTO, J.F. and MACHADO, W.V.M. - "3d-Transition Metal Impurities in Boron Nitride and Gallium Nitride". In: *17th European Conference on Diamond, Diamond-Like Materials, Carbon Nanotubes, Nitrides & Silicon Carbide (Diamond 2006),* Estoril, Portugal, September 1-14 (2006).

6. ASSALI, L.V.C.; LARICO, R.; JUSTO, J.F. and MACHADO, W.V.M. - "Cobalt in Diamond: An Ab Initio Investigation". In: *17th European Conference on Diamond, Diamond-Like Materials, Carbon Nanotubes, Nitrides & Silicon Carbide (Diamond 2006),* Estoril, Portugal, September 1-14 (2006).

7. BONFERRONI, B.; FERRETTI, A.; CALZOLARI, A.; CUCINOTTA, C. S.; RUINI, A. and CALDAS, M.J. - "Ab Initio Electronic and Transport Properties of a Hybrid Si/organic/Si Interface". In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

8. BOWERS, C.R.; CALDWELL, J. D. and GUSEV, G. M. - Temperature Dependence of the Resistively detected Electron Spin Resonance Signals in a Wide Parabolic Quantum Well". In: *17th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics (HMF)*, Würzburg, Alemanha, July 30-August 04 (2006).

9. CALZOLARI, A.; RUINI, A.; CALDAS, M.J. and MOLINARI, E. - "Surface Nanopatterning through Styrene Adsorption on Si(100)". In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

10. CLIFFORD, R.B.; CALDWELL, J.D. and GUSEV, G.M. - "Electrically detected Magnetic Resonance Spectroscopy in a Wide Parabolic Quantum Well". In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

11. CORNEJO, D.R.; PADRÓN-HERNÁNDEZ, E. - "Study of Magnetization Process in ordered Fe Nanowire Arrays". In: *3rd Joint European Magnetic Symposia*, San Sebastian, Espanha, June 24-July 2 (2006).

12. DÁVILA, L.Y.A. and CALDAS, M.J. - "Theoretical Study of the Organic Semiconductor Polyaniline". In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

13. FAZZIO, A.; AMORIM, R.G.; ROSSI, M.; NOVAES, F.D. and SILVA, A.J.R. da - "Defects and Charge Transport in Carbon Nanotubes". In: *209th Electrochemical Society Meeting, Denver*, Colorado, Estados Unidos, May 7-12 (2006).

14. FAZZIO, A.; ARANTES, J.T. and SILVA, A.J.R. da - "Mn in GaAs and Ge Nanowires". In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

15. FAZZIO, A.; ARANTES, J.T.; LEÃO, C.R. and SILVA, A.J.R. da - "Electronic and Structural Properties of Si and Ge Nanowires". In:

European Materials Research Society (E-MRS) 2006 Spring Meeting, Nice, França, May 29-June 2 (2006).

16. FAZZIO, A.; ARANTES, J.T.; LEÃO, C.R. and SILVA, A.J.R. da - "A Theoretical Study of Si and Ge Nanowires". In: *APS March Meeting 2006*, Baltimore, Maryland, Estados Unidos, March 13-17 (2006).

17. FAZZIO, A.; LEÃO, C.R.; ARANTES, J.T. and SILVA, A.J.R. da - "Electronic and Structural Properties of Si and Ge Nanowires". In: *209th Electrochemical Society Meeting, Denver*, Colorado, Estados Unidos, May 7-12 (2006).

18. GALGANO, G.D. e HENRIQUES, A.B. - "Como Determinar o Eixo Rápido de uma Placa de Onda". In: *14º Simpósio Internacional de Iniciação Científica da Universidade de São Paulo*, São Carlos, São Paulo, 09 a 11 de novembro (2006).

19. GOYA, G.F.; IBARRA, M.R.; LIMA Jr., E.; LANCAROTTE, M.S. and CASSINELLI, N. - "Magnetic Structure and Power Absorption in Magnetite Nanoparticles from a MRI Contrast Agent". In: *Euromech Colloquium 470*, Dresden, Alemanha, February 27-1 March (2006).

20. GOYA, G.F.; IBARRA, M.R.; LANCAROTTE, M.S. and CASSINELLI, N. - "Brownian Rotational Relaxation and Power Absorption in Magnetite Nanoparticles". In: *III Joint European Magnetic Symposia*, San Sebastian, Espanha, June 26-30 (2006).

21. GUSEV, G.M.; DUARTE, C.A.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E. and PORTAL, J.C. - "Interaction Corrections to the Longitudinal Conductivity and Hall Resistivity in High Mobility 2D Systems with Intermediate Density". In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

22. GUSEV, G.M.; DUARTE, C.A.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E. and PORTAL, J.C. - "Landau Level Crossing and Ring-like Structure in a Parabolic Well". In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

23. HENRIQUES, A.B.; GALGANO, G.D.; DÍAZ, B.; RAPPL, P.H.O. and ABRAMOF, E. - "Exchange Interaction Effects in the Optical Properties of $Eu_xPb_{1-x}Te$". In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

24. KVON, Z.D.; GUSEV, G.M.; RENARD, V.T. and PORTAL, J.C. - "Quasiclassical Magnetotransport of Two Dimensional Electrons". In: In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

25. LEE, J. H.; JIA, Y.; HEEG, T.; FREITAS, R. S.; TENNE, D. A.; XI, X. X.; GOPALAN, V.; SCHIFFER, P.; SCHUBERT, J. and SCHLOM D. G. - "Epitaxial $BiMnO_3$ Films with Reduced Twinning and the Effect of Film Composition on Ferromagnetism". In: *2006 Electronic Materials Conference* - TMS, State College, Estados Unidos, June 28-30 (2006).

26. LINO, A.T.; BORGES, P.D.; SCOLFARO, L.M.R.; RODRIGUES, S.C.P. and SILVA Jr., E.F. da - "Optical Properties and Carrier Effective Masses of Rutile SnO_2 as Obtained from Full Relativistic Ab Initio Calculations". In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

27. MARQUES, M.; FERREIRA, L.G.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; FURTHMÜLLER, J. and BECHSTEDT, F. - "Ab Initio Study of GaN/Mn_x $Ga_{1-x}N$ Digital Heterostructure". In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

28. MARQUES, M.; TELES, L.K.; FERREIRA, L.G.; SCOLFARO, L.M.R.; FURTHMÜLLER, J. and BECHSTEDT, F. - "Energy Gap and Bond Lengths of Al_x Ga_y In_{1-x-y} N, Al_x Ga_y In_{1-x-y} P and Al_x Ga_y In_{1-x-y} As Quaternary Alloys". In: *14th International Conference on Superlattices, Nanostructures and Nanodevices*, Istambul, Turquia, July 30-August 04 (2006).

29. MARTIN-SAMOS, L.; BUSSI, G.; RUINI, A.; CALDAS, M.J. and MOLINARI, E. - "Electronic and Optical Properties of Amorphous Silica by First-Principles". In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

30. MELO, L.G.C.; SANTOS, A.D.; ALVAREZ-PRADO, L.M.; SOUCHE, Y. - "Optimization of the Enhancement of the Magneto-Optical Response at the Surface Plasmon Resonance". In: 17th *International Conference on Magnetism*, Kyoto, Japão, August 20-25 (2006).

31. MOTA, R.; FAGAN, S.B. and FAZZIO, A. - "First Principles Study of Titanium-Coated Carbon Nanotubes as Sensors for Carbon Monoxide Molecules". In: *24th European Conference on Surface Science - ECOSS-24,* Paris, França, September 4-8 (2006).

32. NOVAES, F.D.; ROSSI, M.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Ab Initio Charge Transport Through N-Doped Carbon Nanotubes: Microscopic Understanding of Carbon Nanotube Sensors". In: *APS March Meeting 2006*, Baltimore, Maryland, Estados Unidos, March 13-17 (2006).

33. NOVAES, F.D.; ROSSI, M.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Ab Initio Charge Transport Through N-Doped Carbon Nanotubes: Microscopic Understanding of Carbon Nanotube Sensors". In: *24th European Conference on Surface Science - ECOSS-24,* Paris, França, September 4-8 (2006).

34. PAGNOSSIN , I.R.; GUSEV, G.M.; SEABRA, A.C.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E. and PORTAL, J.C. - "Quantum Hall Effect in Bilayer System with Array of Antidots". In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

35. PERES, M.L.; CHITTA, V.A.; GUSEV, G.M. and OLIVEIRA Jr., N.F.; - "Weak-Location in n-and p-Type Films of Pb1-x EuxTe". In: *17th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics (HMF)*, Würzburg, Alemanha, July 30-August 04 (2006).

36. PONTES, R.B.; NOVAES, F.D.; FAZZIO, A. and SILVA, A.J.R. da - "Adsorption and Conductance of BDT on the Au(111) Surface". In: *European Materials Research Society (E-MRS) 2006 Spring Meeting*, Nice, França, May 29-June 2 (2006).

37. PONTES, R.B.; NOVAES, F.D.; FAZZIO, A. and SILVA, A.J.R. da - "Adsorption and Conductance of BDT on the Au(111) Surface". In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

38. PONTES, R.B.; NOVAES, F.D.; FAZZIO, A. and SILVA, A.J.R. da - "Adsorption and Conductance of BDT on the Au(111) Surface". In: *24th European Conference on Surface Science - ECOSS-24,* Paris, France, September 4-8 (2006).

39. PRADO, L.M.A.; SCHOENMAKER, J.; SANTOS, A.D.; FOURNIER, T.; SOUCHE, Y. - "Magneto-optical scanning near-

field microscope". In: Conference on Trends Nanotechnology, Grenoble, França, September 04-08 (2006).

40. RIBEIRO Jr., M.; MARQUES, M.; FERREIRA, L.G.; TELES, L.K. and SCOLFARO, L.M.R. - "Theoretical Study of Magnetic Properties of VN,CrN,MnN,FeN, and com under strain". In: *International Workshop on Nitrides - 2006 (IWN-2006)*, Kyoto, Japão, October 23-27 (2006).

41. RIBEIRO Jr., M.; MARQUES, M.; FERREIRA, L.G.; TELES, L.K. and SCOLFARO, L.M.R. - "Theoretical Investigation of Magnetic Properties of VN, CrN, MnN, FeN, and CoN under Strain". In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

42. RODRIGUES, S.C.P.; D'EURYDICE, M.N.; SIPAHI, G.M.; SCOLFARO, L.M.R. and SILVA Jr., E.F. da - "Theoretical Studies of Quaternary AlInGan-based Alloys for Application in White Light Emission Devices". In: *International Workshop on Nitrides - 2006 (IWN-2006)*, Kyoto, Japão, October 23-27 (2006).

43. RODRIGUES, S.C.P.; SIPAHI, G.M.; MARIN, I.S.P.; CUNHA LIMA, I.C. da; SCOLFARO, L.M.R. and SILVA Jr., E.F. da - " Charge and Spin Distributions in Group-IV Diluted Magnetic Semiconductors". In: *14th International Conference on Superlattices, Nanostructures and Nanodevices*, Istambul, Turquia, July 30-August 04 (2006).

44. RODRIGUES, S.C.P.;SILVA Jr., E.F. da; SIPAHI, G.M.; MARIN, I.S.P. and SCOLFARO, L.M.R. and CUNHA LIMA, I.C. da - "Spin-Polarized Charge Densities in (III, V)- Mn and IV-Mn diluted Magnetic Semiconductors". In: *13th International Conference on Solid Films and Surfaces" (ICSFS-13)*, San Carlos de Bariloche, Argentina, Novembrer 6-10 (2006).

45. SANTOS, M.C. dos - "Magnetic States and Peierls Instability in Polyacene". In: *The International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals - ICSM2006,* Dublin, Irlanda, July 2-7 (2006).

46. SCHIFFER, P.; WANG, R.F.; NISOLI, C.; FREITAS, R.S.; LI, J.; McCONVILLE, W.; COOLEY, B.J.; LUND, M.S.; SAMARTH, N.; LEIGHTON, C.; CRESPI, V.H.; UELAND, B.; LAU, G. and CAVA, R. - "Artificial and Stuffed Spin Ice". In: *Highly Frustrated Magnetism 2006*, Osaka, Japan, August 15-19 (2006).

47. SCHMIDT, T.M.; VENEZUELA, P.; ARANTES, J.T. and FAZZIO, A. - "Magnetic Properties of InMnP Nanowires: An Ab Initio Study". In: *European Materials Research Society (E-MRS) 2006 Spring Meeting*, Nice, França, May 29-June 2 (2006).

48. SCOLFARO, L.M.R.; RIBEIRO Jr., M.; MARQUES, M.; FERREIRA, L.G. and TELES, L.K. - "Magnetic and Electronic Properties of Strained Transition Metal Nitrides". In: *14th International Conference on Superlattices, Nanostructures and Nanodevices*, Istambul, Turquia, July 30-August 04 (2006).

49. SHIBLI, S.M.; JORGE, F.O. and PARTITI, C.S.M. - "The Study of Aging Effect of a Ferrofluid Sample". In: *10th Latin American Conference on the Applications of Mössbauer Effect - LACAME 2006*, Rio de Janeiro, RJ, November 5-9 (2006).

50. SILVA, A.J.R. da; AMORIM, R.G.; ROSSI, M.; NOVAES, F.D.; FAZZIO, A. and ANTONELLI, A. - "Defects and Charge Transport in Carbon Nanotubes". In: *European Materials Research Society (E-MRS) 2006 Spring Meeting*, Nice, França, May 29-June 2 (2006).

51. SILVA, A.J.R. da; AMORIM, R.G.; ROSSI, M.; NOVAES, F.D.; FAZZIO, A. and ANTONELLI, A. - "Defects and Charge Transport in Carbon Nanotubes". In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

52. SILVA, A.J.R. da; LEÃO, C.R. and FAZZIO, A. - "Si and SiGe Nanowires". In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

53. SILVA, A.J.R. da; NOVAES, F.D.; HOBI JR., E.; FAZZIO, A. and SILVA, E.Z. da - "Oxygen Clamps in Gold Nanowires". In: *APS March Meeting 2006*, Baltimore, Maryland, Estados Unidos, March 13-17 (2006).

54. SILVA, A.J.R. da; NOVAES, F.D.; HOBI JR., E.; FAZZIO, A. and SILVA, E.Z. da - "Oxygen Clamps in Gold Nanowires". In: *European Materials Research Society (E-MRS) 2006 Spring Meeting*, Nice, França, May 29-June 2 (2006).

55. SILVA, C.C.; LEITE ALVES, H.W. and SCOLFARO, L.M.R. - "Frequency Dependence of the Dielectric Constants and of the Reflectivity for HfO_2 and ZrO_2 from First Principles Calculations". In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

56. SOTOMAYOR, N.M.; CABRAL, L.A. and GUSEV, G. M. - "Classical Magnetoresistance of a Two-Dimensional Electron Gas constrained to Non-Planar Topographies in Antidote Lattice under Titled Magnetic Field". In: *28th International Conference on the Physics of Semiconductors - (ICPS-28)*, Vienna, Áustria, July 24-28 (2006).

57. VIANI, L. and SANTOS, M.C. dos - "Ab Initio Study of the Endohedral Fullerene Isomers N@C_{60} and C@C_{59}N". In: *The International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals - ICSM2006,* Dublin, Irlanda, July 2-7 (2006).

58. ZANELLA, I.; FAZZIO, A. and SILVA, A.J.R. da - *"Adsorption of C_{59}Si and C_{60}N on Si(100) Monohydride Surface".* In: *209th Electrochemical Society Meeting, Denver*, Colorado, Estados Unidos, May 7-12 (2006).

59. ZEVALLOS, A.M.O. de; MAMANI, N.C. and GUSEV, G. M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E. and PORTAL, J.C. - "Hall Resistance and Many-Body Effects in a Parabolic Well". In: *17th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics (HMF)*, Würzburg, Alemanha, July 30-August 04 (2006).

60. ZURBUCHEN, M.A.; BIEGALSKI, M.D.; FREITAS, R.S.; WILSON, M.; SCHIFFER, P.; SCHUBERT, J.; FULK, S.J.; COMSTOCK, D.J. and SCHLOM, D.G. - "Natural Multiferroic Superlattices". In: *2006 MRS Fall Meeting*, Boston, Estados Unidos, November 27-December 1 (2006).

5.2 Trabalhos Apresentados em Eventos Nacionais:

1. ALVES-SANTOS, M. e CALDAS, M.J. - "Core Level Energy Calculations in the First Principles PAW Code". In: *X Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica (X EBEE)*, Niterói, Rio de Janeiro, de 10 a 14 de julho de 2006.

2. ALVES-SANTOS, M.; CALDAS, M.J.; PETRILLI, H. M. e BLÖCHL, P.E. - "Electronic and Structural Properties of the (101) Surface of TI02 Anatase". In: *IV Encontro da Sociedade Brasileira de Pesquisa em Materiais*, Recife, Pernambuco, de 16 a 19 de outubro de 2005.

3. ALVES-SANTOS, M.; PETRILLI, H.M.; CALDAS, M.J. e BLÖCHL, P.E. - "Electronic and Structural Properties of the TiO_2

Anatase(101) Surface and Core Level Energy Calculations". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

4. AMORIM, R.G.; NOVAES, F.D.; FAZZIO, A.; SILVA, A.J.R. da e ANTONELLI, A. - "Influence of Two Vacancies in Bundles and Isolated Carbon Nanotubes". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

5. ANDRADE-FILHO, T.S.; MARTINS, H.S.; GESTER, R.M.; FERREIRA, R.; COSTA, S.C.S.; DEL NERO, J.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - "A Sequential Monte Carlo Quantum Mechanics Calculations of Trans-Resveratrol in Aqueous Solution". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

6. CAMPOS, M.F. de; MISSELL, F.P.; MURAKAMI, R.K.; ROMERO, S.A.; RECHENBERG, H.R. e NEIVA, A.C. - "Rietveld Analysis of Nanocrystalline Sm(Cofecuzr)Z Magnets". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

7. CARNEIRO, A.S.; JARDIM, R.F.; FONSECA, F.C. e KIMURA, T. - "Relaxation of the Electrical Resistivity in Cr doped $Nd_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ Single Crystals". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

8. CARVALHO, A.C.M. e SANTO, M.C. dos - "Nitrogen Incorporation Influence on Geometry and Electronic Properties of Nanostructures". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

9. CHAUDHURI, P. e CANUTO, S. - "Density Functional Study on the Structure, Energetics and Conformational Behavior of Glycine Homo-Polypeptides and Glycine Cluster in Gas Phase". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

10. CHITTA, V.A.; PERES, M.L.; OLIVEIRA Jr, N.F.; DESRAT, W;. MAUDE, D.K.; PIOT, B.A.; RAPPL, P.H.O.; UETA, A.Y. e ABRAMOF, E. - "Integer Quantum Hall Effect in a Multivalley PbTe Quantum Well". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

11. CHOQUE, N.M.S. e GUSEV, G.M. - "Interplay of Antidot Scattering and Constrained Motion of Two-Dimensional Electrons in Tilted Magnetic Field". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

12. CHOQUE, N.M.S.; ROCHA Neto, J.F. da e GUSEV, G.M. - "Magnetoresistance of Two-Dimensional Electrons under the Influence of Spatially Modulated Magnetic Fields". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

13. CORNEJO, D.R. - "Magnetic Interactions in ordered Fe Nanowire Arrays: Experiment and Modeling". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

14. CORNEJO, D.R. e GÓMEZ, S.L. - "A Study of the Static and Dynamic Magnetic Behavior of Ferronematic Liquid Crystals". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

15. COSTA, S.C.S.; COUTINHO, K.; CANUTO, S.; DE OLIVEIRA, R.J.; FAUSTINO, W.M.; GALEMBECK, A.; SAMPAIO-SILVA, A. e DEL NERO, J. - "Investigação Teórica/Experimental de Novos Dispositivos Orgânicos via Sol-Gel". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

16. COSTA, S.C.S.; SILVA, S.B.C.; GALEMBECK, A.; COUTINHO, K.; CANUTO, S. and DEL NERO, J. - "Sol-Gel/POPOP Supramolecular Optoeletronic Device". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

17. COSTA, S.C.S.; SILVA, S.B.C.; GALEMBECK, A.; COUTINHO, K.; CANUTO, S. e DEL NERO, J. - "Sensores de Gás em Sol-Gel Incorporados com Indicadores Azo". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

18. COUTINHO, K. e CANUTO, S. - "Utilização de Método Híbrido QM/MM para Estudar Efeitos de Solventes em Espectroscopia Eletrônica". In: *IV Workshop em Física Molecular e Espectroscopia*, Salvador, Bahia, 20 a 23 de novembro de 2006.

19. DÁVILA, L.Y.A. e CALDAS, M.J. - "Estudo Ab Initio das Propriedades Eletrônicas de Cristais de Polianilina". In: *XXIX*

Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

20. DÁVILA, L.Y.A.; RAMOS, R. e CALDAS, M.J. - "Simulação Tórica de Popriedades Etruturais de Flmes de Plianilina". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

21. FERREIRA, L.M.; PAGLIUSO, P.G.; URBANO, R.R.; GRATENS, X.; OLIVEIRA Jr., N.F.; MOVSHOVICH, R.; SARRAO, J.R. e THOMPSON, J.D. - High Field Phase Diagram of Pure and Gd-doped $Cecoin_5$: A Magnetization Study". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

22. FERREIRA, R.; GESTER, R.M.; MARTINS, H.S.; ANDRADE-FILHO, T.S.; ATHAYDE FILHO, T.L.; DEL NERO, J.; SILVA, S.B.C.; GALEMBECK, A.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - "Aplicação do Método de Monte Carlo em Simulação Computacional de Interação Molecular: Harmana e Água". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

23. FONSECA, T.L.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - "Estrutura e Interação da Ligação de Hidrogênio Formada entre Acetona e Água Supercrítica". In: *IV Workshop em Física Molecular e Espectroscopia*, Salvador, Bahia, 20 a 23 de novembro de 2006.

24. GALGANO, G.D. e HENRIQUES, A.B. - "Determining the Fasta Xis of a Wave Plate". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

25. GAMA, L.; SILVA, V.J. da; COSTA, A.C.F.M. CORNEJO, D.R.; AZEVEDO, A. e REZENDE, S.M. - "Efeito da Inclusão do Cromo nas Características Morfológicas e Magnéticas de Pós de Ferritas Ni-Zn". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

26. GEORG, H.C.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - "Polarização do Soluto e o Efeito do Solvente no Espectro Eletrônico". In: *IV Workshop em Física Molecular e Espectroscopia*, Salvador, Bahia, 20 a 23 de novembro de 2006.

27. GESTER, R.M.; FERREIRA, R.C.; SARAIVA-SOUZA, A.; DEL NERO, J.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - "Solvent Influence in the Ultra-Violet Visible Absorption Spectra of Pyrazine Derivative: A Monte Carlo/Quantum Mechanics Sequential Treatment". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

28. GESTER, R.M.; FERREIRA, R.C.; SARAIVA-SOUZA, A.; DEL NERO, J.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - "Solvent Effects in the UV-Vis Absorption Spectra of Furan-2,3-Dione Derivative: A Monte Carlo/Quantum Mechanics Investigation". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

29. GIRO, R. e CALDAS, M.J. - "Geometrical Features of the Interfaces between Au/PPV and PPV/Au using Classical Molecular Dynamics Simulations". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

30. JORGE, L.M.M. e CALDAS, M.J. - "Estrutura Eletrônica de co-polímeros conjugados em bloco". In: 14º Simpósio Internacional de Iniciação Científica da Universidade de São Paulo, Escola Politécnica da USP, em 09 de novembro de 2006.

31. LEÃO, C.R.; SILVA, A.J.R. da e FAZZIO, A. - "Electronic and Structural Properties of Semiconducting Nanowires". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

32. LEITE ALVES, H.W; CAETANO, E.W.S.; FLORES, M.Z.S.; FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A. SCOLFARO, L.M.R.; OLIVEIRA, M.C.F. de; PINHEIRO, J.A. e LIMA Filho, J. L. de - "Ab Initio Calculations of the Dynamical Properties of Alpha-Glycine and L-Alanine". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

33. LINO, A.T.; BORGES, P.D.; SCOLFARO, L.M.R.; FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A. e SILVA Jr., E.F. da - "Optical Properties and Effective Carrier Masses of High-K Oxides HFO_2, $$ZrO_2$ and SnO_2 as obtained from Full Relativistic Ab Initio Calculations". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

34. LUDWIG, V.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - "Photophysical Properties of Uracil in Gas and in Aqueous Solution". In: *IV*

Workshop em Física Molecular e Espectroscopia, Salvador, Bahia, 20 a 23 de novembro de 2006.

35. MALASPINA, T. e CANUTO, S. - "Efeito Solvente na Transição Eletrônica $n \rightarrow \pi^*$ do Formaldeído em Água". In: *IV Workshop em Física Molecular e Espectroscopia*, Salvador, Bahia, 20 a 23 de novembro de 2006.

36. MANFRINI, M.A.; HENRIQUES, A.B.; RAPPL, P.H.O.; ABRAMOF, E. e MORENO, B.L.D. - "Band-edge Polarized Optical Absorption in Europium Telluride". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

37. MARTINS, A.; PRADRO, R.J.; FANTINI, M.C.A.; SOUZE NETO, N.M.; RAMOS, A.Y. e SANTOS, A.D. - "Local structure of FePt thin films investigated by polarized X-ray absorption spectroscopy". In: *V Encontro da Sociedade Brasileira de Pesquisa da Matéria*, Florianópolis, Santa Catarina, 8 a 12 de outubro de 2006.

38. MARTINS, H.S.; ANDRADE-FILHO, T.S.; DEL NERO, J.; COUTINHO, K. e CANUTO, S. - "Simulação de Uracil em Fase Gasosa e Solução Aquosa Via Método Seqüencial Monte Carlo/Mecânica Quântica". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

39. MASUNAGA, S.H. e JARDIM, R.F. - "Propriedades Magnéticas de Nnocompósitos de Ni-SiO_2". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

40. MENEZES, R.D.; JUSTO, J.F. e ASSALI, L.V.C. - "Structural and Thermal Properties of Silicon Nanowires a Theoretical Investigation". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006..

41. MIWA, R.H.; SCHMIDT, T.M. e FAZZIO, A. - "Defeitos Intrínsecos em Nanofios de InP, Antísitios". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

42. MOREIRA, M.D.; VENEZUELA, P.; SCHMIDT, T.M. e FAZZIO, A. - "Estudo da Passivação da Superfície de Nanofios de InP". In:

XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

43. MORENO, B.L.D.; RAPPL, P.H.O.; GALGANO G.D. e HENRIQUES A.B. - "High-Resolution X-ray Diffraction Analysis of $Pb_{1-x}Eu_xTe$ ($0.8 \leq x \leq 1.0$) epitaxial layers". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

44. NOCE, R.D. BARELLI, N.; BENEDETTI, A.V.; PAULO T.A. SUMODJO, P.T.A. e CORNEJO, D.R. - "Magnetic Properties of Nanocrystalline COPD Alloys obtained by Electrodeposition". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

45. PEIXOTO, T.R.F.; CORNEJO, D.R. e HERNÁNDEZ, E.P. - "Análise do Diagrama FORC de Redes Auto-Organizadas de Nanofios de Fe". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

46. PERES, M.L.; CHITTA, V.A.; OLIVEIRA Jr, N.F.; RAPPL, P.H.O.; UETA, A.Y. e ABRAMOF, E. - "Magnetoresistance and Anderson localization Pn P-Type $Pb_{1-x}Eu_xTe$". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

47. POJAR, M.; SCHOENMAKER, J.; LANCAROTTE, M.; SANTOS, A.D. dos; SEABRA, A.C. e SOUCHE, Y. - "Estudo de Propriedades Magnéticas em Objetos Microestruturados". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

48. POJAR, M.; SCHOENMAKER, J.; ROMERO, S.A.; SEABRA, A.C.; SOUCHE, Y. e SANTOS. A.D. - "Magnetic Properties on Micrometric Objects". In: *V Encontro da Sociedade Brasileira de Pesquisa da Matéria*, Florianópolis, Santa Catarina, 8 a 12 de outubro de 2006.

49. RAMOS, R. e CALDAS, M.J. - "Functionalized Diamod Surfaces". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

50. RAMOS, R. e CALDAS, M.J. - "Study of Functionalization of Diamond Surfaces using Tight Binding Molecular Dynamics". In: *X*

Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica (X EBEE), Niterói, Rio de Janeiro, de 10 a 14 de julho de 2006.

51. RECHENBERG, H.R.; MORELLON, L.; ALGARABEL, P.A. e IBARRA, M.R. - "Magnetic Moment at Nonmagnetic Fe Sites of Antiferromagnetic Laves Phase Compounds". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

52. RIBEIRO Jr., M.; MARQUES, M.; SCOLFARO, L.M.R.; FERREIRA, L.G. e TELES, L.K. - "Ab Initio Calculation Of Transition Metals Nitrides Under Strain: Structural and Magnetic Properties". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

53. RODRIGUES, S.; CUNHA, J.B.M. da; RECHENBERG, H.R.; SANTOS, C.A. dos e KINAST, E.J. - "Propriedades Cristalográficas e Magnéticas do Sistema Trirutilo $Fe_xNi_{1-x}Ta_2O_6$". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

54. RODRIGUES, S.C.P. e SCOLFARO, L.M.R. - "Distribuições de Carga e Spin em Semicondutores Magnéticos Diluídos do Grupo IV". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

55. RODRIGUES, S.C.P.; MARIN, I.S.P.; SIPAHI, G. M.; SCOLFARO, L.M.R.; SILVA JR., E.F. da e CUNHA LIMA, I.C. da - "Charge and Spin Distribution in (III,V)-Mn Ferromagnetic Multilayers". In: *V Encontro da Sociedade Brasileira de Pesquisa da Matéria*, Florianópolis, Santa Catarina, 8 a 12 de outubro de 2006.

56. RODRIGUES, S.C.P.; SCOLFARO, L.M.R.; SILVA Jr., E.F. da; SIPAHI, G.M.; MARIN, I.S.P. e CUNHA LIMA, I.C. da - "Distribuições de Carga e Spin em Semicondutores Magnéticos Diluídos do Grupo IV". In: *V Encontro da Sociedade Brasileira de Pesquisa da Matéria*, Florianópolis, Santa Catarina, 8 a 12 de outubro de 2006.

57. RODRIGUES, S.C.P.; SCOLFARO, L.M.R.; SILVA Jr., E.F. da; SIPAHI, G.M.; MARIN, I.S.P.; e CUNHA LIMA, I.C. da - "Propriedades Eletrônicas de Multicamadas Ferromagnéticas (III,V)-Mn e IV-Mn". In: *V Encontro da Sociedade Brasileira de*

Pesquisa da Matéria, Florianópolis, Santa Catarina, 8 a 12 de outubro de 2006.

58. ROSSI, M.; NOVAES, F.D.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Ab Initio Study for NH_3 Sensors Based on CN_x Nanotubes". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

59. SANTOS, M.C. dos - "Electronic Properties of Acenes: from Oligomer to Polymer Structure". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

60. SANTOS, M.C. dos; LIMA, L.C.S; SANTOS, A.D. dos e AMARAL, L. - Propriedades Magnéticas de Multicamadas de Co/Pt antes e após a Irradiação com He^+". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

61. SILVA, C.R. e CORNEJO, D.R. - "Construção de um Magnetômetro de Gradiente Alternado para Caracterização de Nanofios Magnéticos De Fe, Co E Ni". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

62. SILVA, M.L. e CALDAS, M.J. - "Propriedades Estruturais e Vibracionais de Polifluorenos". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

63. SIPAHI, G.M.; SILVA SANTOS, E.M. da; MARIN, I.S.P.; D`EURYDICE, M.N.; RODRIGUES, S.C.P.; SCOLFARO, L.M.R. e SILVA Jr., E.F. da - "Optical Properties from Nitride Semiconductor Quantum Dots". In: *V Encontro da Sociedade Brasileira de Pesquisa da Matéria*, Florianópolis, Santa Catarina, 8 a 12 de outubro de 2006.

64. SODRÉ, N.; SCHÖN, C.G. e PETRILLI, H.M. - "Diagrama de Fases do Fe-Cr-Al através de Cálculos Ab-Initio". In: X Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, Niterói, Rio de Janeiro, 10 a 14 de julho de 2006.

65. SOUSA, R.L. e CALDAS, M.J. - "Study of Reactions for p-Dihydroxydiphenyl on Hydrogenated Silicon Surfaces". In: *XXIX*

Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

66. SOUSA, R.L. e CALDAS, M.J. - "Study of Reactions of Alcolhols on Hydrogentated Si(100) Surfaces". In: *X Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica (X EBEE)*, Niterói, Rio de Janeiro, de 10 a 14 de julho de 2006.

67. TRIPPE, S.C.; ROMERO, S.A. e SANTOS, A.D. dos - "Projeto e Desenvolvimento de um Gerador Físico de Nanopartículas". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

68. VIANI, L. e SANTOS, M.C. dos - "Ab Initio Study of the Endohedral Fullerene Isomers NaC_{60} and $CaC_{59}N$". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

69. ZEVALLOS, A.M.O.; MAMANI, N.C.; GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E. e PORTAL, J.C. - "Variação do Coeficiente Hall em Poços Parabólicos Largos de $Al_xGa_{x-1}As$ em Função do Campo Magnético". In: *XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*, São Lourenço, Minas Gerais, 09 a 13 de maio de 2006.

5.3 Trabalhos Publicados em Periódicos de divulgação Internacional e com Árbitro:

1. AGUIAR, O.D.; ANDRADE, L.A., BARROSO, J.J.; BORTOLI, F.; CARNEIRO, L.A.; CASTRO, P.J.; COSTA, C.A.; COSTA, K.M.F.; ARAÚJO, J.C.N. de; LUCENA, A.U. de; PAULA, W. de; NETO, E.C.D., SOUZA, S.T. de; FAUTH, A.C.; FRAJUCA, C.; FROSSATI, G.; FURTADO, S.R.; MAGALHÃES, N.S.; MARINHO, R.M.; MELO, J.L.; MIRANDA, O.D.; OLIVEIRA Jr., N.F.; RIBEIRO, K.L.; STELLATI, C.; VELLOSO, W.F. and WEBER, J. - "The Brazilian Gravitational Wave Detector Mario Schenberg: Status Report", *Classical and Quantum Gravity* 23 (8): S239-S244 Sp. Iss. SI (2006).

2. ALVAREZ-PRADO, L.M.; SCHOENMAKER, J.; SANTOS, A.D. dos; FOURNIER, T.; SOUCHE, Y. - "Magneto-Optical Scanning Near-Field Microscope", *Physica Status Solidi A - Applications and Materials Science* 203 (6): 1425-1430 (2006).

3. ALVES, C.R.; AQUINO, R.; DEPEYROT, J. and RECHENBERG, H.R. - "Surface Spin Freezing of Ferrite Nanoparticles evidenced by Magnetization Measurements", *Journal of Applied Physics* 99 (8): 08M905 (2006).

4. ALVES-SANTOS, M.; DAVILA, L.Y.A.; PETRILLI, H.M.; CAPAZ, R.B. and CALDAS, M.J. - "Application of Standard DFT Theory for Nonbonded Interactions in Soft Matter: Prototype Study of Poly-para-phenylene", J*ournal of Computational Chemistry* 27 (2): 217-227 (2006).

5. AQUINO, R.; ALVES, C.R.; DEPEYROT, J.; COTTA, T.A.P.; SOUSA, M.H.; TOURINHO, F.A.; RECHENBERG, H.R. and GOYA, G.F. - "Surface Spin Freezing of Ferrite Nanoparticles evidenced by Magnetization Measurements", *Journal of Applied Physics* 99 (8): 08M905 (2006).

6. ASSALI, L.V.C.; MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F. - "Manganese Impurities in Boron Nitride", *Applied Physics Letters* 89 (7): 72102-72102 (2006).

7. AYRES, F.; ASSALI, L.V.C.; MACHADO, W.V. M. and JUSTO, J.F. - "Role of Intrinsic Defects in the Electronic and Optical Properties of Alpha-HgI2", *Applied Physics Letters* 88 (1): 11918-11918 (2006).

8. BAIERLE R.J.; PIQUINI, P.; SCHMIDT, T.M. and FAZZIO, A. - "Hydrogen Adsorption on Carbon-Doped Boron Nitride Nanotube", *Journal of Physical Chemistry B*, 110 (42): 21184-21188 (2006).

9. BARRERO, C.A.; BETANCUR, J.D.; GRENECHE, J.M.; GOYA, G.F. and BERQUÓ, T.S. - "Magnetism in Non-Stoichiometric Goethite of varying Total Water Content and Surface Area", *Geophysical Journal International* 164 (2): 331-339 (2006).

10. BECHTOLD, I.H.; BATALIOTO, F.; THIEGHI, L.T. ; HONDA, B.S.I.; POJAR, M.; SCHOENMAKER, J.; SANTOS, A.D. dos; ZUCOLOTTO, V.; BALOGH, D.T.; OLIVEIRA Jr, O.N.; and OLIVEIRA, E.A. - "Transitions in the Orientational Order of Liquid Crystals induced by Periodic Patterned Substrates", *Physical Review E* 74 (2): 021714 (2006).

11. BERGMAN, A.; BURKERT, T.; SANYAL, B.; FROTA-PESSÔA, S.; NORDSTRÖM, L.; RUBAN, A.V.; SIMAK, S.I. and ERIKSSON, O.

- “Magnetic Properties of Fe/Co(001) Superlattices from First-Principles Theory”, *Physical Review B* 74: 174409 (2006).

12. BERGMAN, A.; NORDSTRÖM, L.; KLAUTAU, A.B.; FROTA-PESSÔA, S. and ERIKSSON, O. - “Magnetic Interactions of Mn Clusters Supported on Cu”, *Physical Review B* 73: 174434 (2006).

13. BERGMAN, A.; NORDSTRÖM, L.; KLAUTAU, A.B.; FROTA-PESSÔA, S. and ERIKSSON, O. - “Non-Collinear Magnetization of V Clusters Supported on a Cu (111) surface: Theory”, *Surface Science* 600: 4838-4842 (2006).

14. BORIN, A.C.; SERRANO-ANDRES, L.; LUDWIG, V. and CANUTO, S. - “Theoretical Electronic Spectra of 2-aminopurine in Vapor and in Water”, *International Journal of Quantum Chemistry* 106 (13): 2564-2577 Sp. Iss. SI (2006).

15. BOWERS, C.R.; CALDWELL, J.D.; GUSEV G.M.; KOVALEV, A.E.; OLSHANETSKY, E.; RENO, J.L.; SIMMONS, J.A. and VITKALOV SA - “Dynamic Nuclear Polarization and Nuclear Magnetic Resonance in the Vicinity of Edge States of a 2DES in GaAs Quantum Wells”, *Solid State Nuclear Magnetic Resonance* 29 (1-3): 52-65 (2006).

16. BUENO-BAQUES, D.; CORNEJO, D.R.; PADRON-HERNANDEZ, E; GALLARDO, P.S.; FERNANDEZ, O.R. and MATUTES-AQUINO, J.A. - “Sr Ferrite-MQP Hybrid Bonded Magnets”, *International Journal of Materials & Product Technology* 27 (1-2): 71-79 (2006).

17. CABRAL, B.J.C. and CANUTO, S. - “Reply to Comment on The Enthalpy of the O-H Bond Homolytic Dissociation: Basis-set extrapolated Density Functional Theory and Coupled Cluster Calculations”, *Chemical Physics Letters* 417 (4-6): 570-572 (2006).

18. CALZOLARI, A.; RUINI, A.; MOLINARI, E. and CALDAS, M.J. - “Surface Nanopatterning through Styrene Adsorption on SiB(100)”, *Physical Review B* 7312 (12): 5420-5420 (2006).

19. CAMPOS, M.F. de; NEIVA, A.C., ROMERO, S.A. and RECHENBERG, H.R. - “The (SmZr)Co-3 Phase in Sm(CoFeCu Zr)(Z) Magnets”, *IEEE Transactions on Magnetics* 42 (11): 3770-3772 (2006).

20. CAMPOS, M.F. de; ROMERO, S.A.; NEIVA, A.C.; TROTA Filho, J.; LIZÍDIO, L.R. and RECHENBERG, H.R. - "Zr-rich Phases in Sm(CoFeCuZr)z Magnets", *Materials Science Forum* 530-531: 158-163 (2006).

21. CANUTO, S. and GAMA, A.A. - "Proceedings of the XIII Brazilian Symposium of Theoretical Chemistry", Preface - I*nternational Journal of Quantum Chemistry* 106 (13): 2551-2551 Sp. Iss. SI (2006).

22. CARNEIRO, A.S.; JARDIM, R.F. and FONSECA, F.C. - "Current ocalization and Joule self-heating effects in Cr-doped Nd0.5Ca0.5MnO3 manganites", *Physical Review B* 7301 (1): 2410-2410 (2006).

23. CARVALHO, A.C.M. and SANTOS, M.C. do - "Nitrogen-substituted Nanotubes and Nanojunctions: Conformation and Electronic Properties", J*ournal of Applied Physics* 100 (8): 84305-84305 (2006).

24. CHAUDHURI, P. and CANUTO, S. - "Rayleigh Scattering Properties of Small Polyglycine Molecules", *Journal of Molecular Structure-Theochem* 760 (1-3): 15-20 (2006).

25. CHITTA, V.A.; DESRAT, W.; MAUDE, D.K., PIOT, B.A.; OLIVEIRA Jr., N.F.; RAPPL, P.; UETA, A.Y. and ABRAMOF, E. - "Integer Quantum Hall Effect in a PbTe Quantum Well", *Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures* 34 (1-2): 124-127 (2006).

26. COUTO, P.C. do; CABRAL, B.J.C. and CANUTO, S. - "Electron Binding Energies of Water Clusters: Implications for the Electronic Properties of Liquid Water", *Chemical Physics Letters* 429 (1-3): 129-135 (2006).

27. CUCINOTTA, C.S.; BONFERRONI, B.; FERRETTI, A.; RUINI, A.; CALDAS, M.J. and MOLINARI, E. - "First-Principles Investigation of Functionalization-Defects on Silicon Surfaces", *Surface Science* 600 (18): 3892-3897 Sp. Iss. SI (2006).

28. DALPIAN, G.M.; WEI, S.H.; GONG, X.G.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Phenomenological Band Structure Model of Magnetic Coupling in Semiconductors", *Solid State Communications*, 138 (7): 353-358 (2006).

29. DUARTE, C.A.; GUSEV G.M.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E. and PORTAL, J.C. -"Electric Field controlled G-Factor in Parabolic Well Determined by Transport Measurements", *Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures* 34 (1-2): 329-332 (2006).

30. DUARTE, C.A.; GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A. and LAMAS, T.E. - "Spin Valve Effect and Hall Resistance in a Wide Parabolic Well", *Brazilian Journal of Physics* 36 (2A): 488-491 (2006).

31. DUARTE, E.L.; ITRI, R.; LIMA Jr., E.; BAPTISTA, M.S.; BERQUÓ, T.S. and GOYA, G.F. - "Large Magnetic Anisotropy in Ferrihydrite Nanoparticles Synthesized from Reverse Micelles", *Nanotechnology* 17 (22): 5549-5555 (2006).

32. ESCOTE, M.T.; BARBETA, V.B.; JARDIM, R.F. and CAMPO, J. - "Metal-Insulator Transition in $Nd_{1-x}EuxNiO_3$ Compounds" - *Journal of Physics-Condensed Matter* 18 (26): 6117-6132 (2006).

33. FAGAN SB; FAZZIO, A. and MOTA, R. - "Titanium Monomers and Wires adsorbed on Carbon Nanotubes: a First Principles Study", *Nanotechnology* 17 (4): 1154-1159 (2006).

34. FÁVERO, P.P.; PARISE, M. de SOUZA; FERNANDEZ, J.R.L.; MIOTTO, R. and FERRAZ, A.C. - "Surface Properties of CdS Nanoparticles", *Brazilian Journal of Physics*, 36 (3B):1032-1034, (2006).

35. FERRAZ, A.C. and MIOTTO, R. - "Glycine Adsorption on Silicon (001)", *Brazilian Journal of Physics* 36 (2A): 309-312 (2006).

36. FIELD, L.M.; MORON, M.C.; LAHTI, P.M.; PALACIO, F; PADUAN-Filho, A. and OLIVEIRA Jr., N.F. - "Co-3(RL)(2)(hfac)(6) Ladder Complex of 5-[4-(N-tert-butyl-N-aminoxyl)phenyl] Pyrimidine", *Inorganic Chemistry* 45 (6): 2562-2567 (2006).

37. FRANCO, D.R.; BERQUÓ, T.S.; IMBERNOM, R.A.L.; PARTITI, C.S.M. and ENZWEILER, J. - "Environmental Monitoring of Magnetic Iron Phases of Urban Water Reservoir Lake Sediments (Taiaçupeba Lake, metropolitan region of São Paulo, Brazil) by using Mössbauer Spectroscopy", *Environmental Geology* http://dx.doi.org/10.1007/s00254-006-0525-5 (2006).

38. FROTA-PESSÔA, S. and KLAUTAU, A.B. - "Theoretical Investigation of 3d Nanostructures on Cu Surfaces: The Influence

of Local Environment", *Sinternation Journal of Modern Physics B* 20 (30-31): 5281-5290 (2006).

39. GAMA L.; DINIZ, A.P.; COSTA, A.C.F.M. and CORNEJO, D.R. - "Magnetic Properties of Nanocrystalline Ni-Zn Ferrites doped with Samarium", *Physica B-Condensed Matter* 384 (1-2): 97-99 (2006).

40. GARCIA, J.C.; SCOLFARO, L.M.R.; LINO, A.T.; FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A.; SILVA, C.C.; ALVES, H.W.L.; RODRIGUES, S.C.P.; SILVA, E.F. da and GARCIA, J.C. - "Structural, Electronic, and Optical Properties of "ZrO_2 from Ab Initio Calculations", *Journal of Applied Physics* 100 (10): 104103 (2006).

41. GEORG, H.C., COUTINHO, K. and CANUTO, S. - "Converged Electronic Polarization of Acetone in Liquid Water and the Role in the n-pi* Transition", *Chemical Physics Letters* 429 (1-3): 119-123 (2006).

42. GICH, M.; FRONTERA, C.; ROIG, A. and RECHENBERG, H.R. - "High- and Low-Temperature Crystal and Magnetic Structures of Epsilon-Fe_2O_3 and their Correlation to its Magnetic Properties", *Chemistry of Materials* 18 (16): 3889-3897 (2006).

43. GONZALES-ORMENO, P.G.; PETRILLI, H.M. and SCHON, C.G. - "Ab Initio Calculation of the bcc Fe-Al Phase diagram including magnetic interactions", *Scripta Materialia* 54 (7): 1271-1276 (2006).

44. GOVEA ALCAIDE, E; ANGLADA RIVERA, J.; JARDIM, R.F. and MUÑE, P. - "Transport Barkhausen-Like Noise and Flux-Flow Regime in Bi1.65Pb0.35Sr2Ca2Cu3O10+6 Ceramic Samples", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 299 (1): 231-239 (2006).

45. GUSEV, G.M.; SOTOMAYOR, N.M.; SEABRA, A.C.; QUIVY, A.A.; LAMAS, T.E. and PORTAL, J.C. - "Quantum Hall Ferromagnet in a Two-Dimensional Electron Gas Coupled with Quantum Dots", *Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures* 34 (1-2): 504-507 (2006).

46. JUSTO, J.F.; MACHADO, W.V.M. and ASSALI, L.V.C. - "Behavior of 3d-Transition Metals in Different SiC Polytypes", *Physica B-Condensed Matter* 376: 378-381 (2006).

47. KISS, F.D. and FERRAZ, A.C. - “The Oxidation Mechanism of CdTe (110) Surface”, *Brazilian Journal of Physics* 36 (2A): 291-293 (2006).

48. KONING, M. de; ANTONELLI A.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - “Orientational Defects in Ice Ih: An Interpretation of Electrical Conductivity Measurements”, *Physical Review Letters* 9607 (7): 075501(2006).

49. KONING, M. de; ANTONELLI, A.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - “Structure and Energetics of Molecular Point Defects in Ice I-h”. *Physical Review Letters* 9715 (15): 155501 (2006).

50. LARICO, R.; JUSTO, J.F.; MACHADO, W.V.M.; and ASSALI, L.V.C. - “Band Gap States of Interstitial Nickel-Complexes in Diamond”, *Physica B-Condensed Matter* 376: 292-295 (2006).

51. LARICO, R.; MACHADO, W.V.M.; JUSTO, J.F. and ASSALI, L.V.C. - “Microscopic Structure of Nickel-Dopant Centers in Diamond”, *Brazilian Journal of Physics* 36 (2A): 267-269 (2006).

52. LAU, G.C.; FREITAS, R.S.; UELAND, B.G.; MUEGGE, B.D.; DUNCAN, E,L,; SCHIFFER, P. and CAVA, R.J. - “Zero-Point Entropy in Stuffed Spin-Ice”, *Nature Physics* 2 (4): 249-253 (2006).

53. LAU, G.C.; UELAND, B.G.; FREITAS, R.S.; DAHLBERG, M.L. ; SCHIFFER, P. ; CAVA, R.J. ; LAU, G.C. and UELAND, B.G. - “Magnetic Characterization of the Sawtooth-Lattice Olivines ZnL_2S_4 (L-Er,Tm,Yb)”, *Physical Review B* 7301 (1): 2413-2413 (2006).

54. LIMA Jr., E.; BRANDL, A.L.; ARELARO, A.D. and GOYA, G.F. - “Spin Disorder and Magnetic Anisotropy in Fe_3O_4 Nanoparticles”, *Journal of Applied Physics* 99 (8): 083908 (2006).

55. LIMA, M.C.P.; COUTINHO, K.; CANUTO, S. and ROCHA, W.R. - “Reaction Mechanism and Tautomeric Equilibrium of 2-Mercaptopyrimidine in the Gas Phase and in Aqueous Solution: A combined Monte Carlo and Quantum Mechanics Study”, *Journal of Physical Chemistry* A 110 (22): 7253-7261 (2006).

56. MACHADO, A.M.; MUNARO, M.; MARTINS, T.D.; DAVILA, L.Y.A.; GIRO, R.; CALDAS, M.J.; ATVARS, T.D.Z. and AKCEIRUD, L.C. - “Photoluminescence Studies of Phenanthrene-Azomethyne

Conjugated-Nonconjugated Multiblock Copolymer", *Macromolecules* 39 (9): 3398-3407 (2006).

57. MALASPINA, T.; FILETI, E.E.; RIVEROS, J.M. and CANUTO, S. - "Ab Initio Study of the Isomeric Equilibrium of the HCN-H_2O and H_2O-HCN Clusters", *Journal of Physical Chemistry* A 110 (34): 10303-10308 (2006).

58. MAMANI, N.C.; DUARTE, C.A.; GUSEV, G.M.; QUIVY, A.A. and LAMAS, T.E. - "Magnetotransport in AlxGax-1As quantum wells with different potential shapes", *Brazilian Journal of Physics* 36 (2A): 336-339 (2006).

59. MARQUES, M.; FERREIRA, L.G.; TELES, L.K.; SCOLFARO, L.M.R.; FURTHMUELLER, J. and BECHSTEDT, F. - "Magnetic Properties of GaN/MnxGa1-xN Digital Heterostructures: First-Principles and Monte Carlo Calculations", *Physical Review B* 73 (22): 224409 (2006).

60. MARQUES, M.; TELES, L.K.; FERREIRA, L.G.; SCOLFARO, L.M.R.; FURTHMUELLER, J. and BECHSTEDT, F. - "Statistical Model applied to A(x)B(y)C(1-x-y)D Quaternary Alloys: Bond Lengths and Energy Gaps of AlxGayIn1-x-yX (X=As, P, or N) Systems", *Physical Review B* 73 (23): 235205 (2006).

61. MARQUES,M.; SCOLFARO,L.M.R.; TELES, L.K.; FURTHMULLER J.; BECHSTEDT, F. and FERREIRA, L.G. - "Theoretical Prediction of Ferromagnetic MnN Layers embedded in Wurtzite GaN", *Applied Physics Letters* 88 (2): 022507 (2006).

62. MARTINEZ-GARCIA, R.; KNOBEL, M.; GOYA, G.F; GIMENEZ, M.C.; ROMERO, F.M. and REGUERA, E. - "Heat-induced Charge Transfer in Cobalt Iron Cyanide", *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 67 (11): 2289-2299 (2006).

63. MARTINS, A.; FANTINI, M.C.A.; SOUZA NETO, SOUZA NETO, N.M. de; RAMOS, A.Y. and SANTOS, A.D. dos - "Alternate Monatomic Layer Sputter Deposition of FCT (L1(0)-type) ordered FePt and CoPt Films", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 305 (1): 152-156 (2006).

64. MARTINS, A.; SOUZA NETO, N.M. de; FANTINI, M.C.A.; SANTOS, A.D. dos; PRADO, R.J. and RAMOS, A.Y. - "X-ray Absorption Spectroscopy Study of FePt Thin Films", *Journal of Applied Physics* 100 (1): 013905 (2006).

65. MARTINS, T.B. and RECHENBERG, H.R. - "Antiferromagnetic $TiFe_2$ in Applied Fields: Experiment and Simulation", Hyperfine Interactions 167: 1273-1277 (2006).

66. MIOTTO, R.; CUNHA, J.F.R.; SILVA, S. W da ; SOLER, M.A.G.; MORAIS, P.C.; FERRAZ, A.C.; TADA, D B ; PETRI, D.F.S. and BAPTISTA, M.S. - "Thionin Adsorption on Silicon (1 0 0): Structural Analysis", *Applied Surface Science* 253 1978-1982 (2006).

67. MURAKAMI, R.K.; RECHENBERG, H.R.; VILLAS-BOAS, V. and McCALLUM, R.W. - "(Pr,Nd)-Fe-B Nanocrystalline Magnetic Materials with TiC Additions", *Journal of Applied Physics* 99 (8): 08B501 (2006).

68. NOCE, R.D.; BARELLI, N.; SUMODJO; P.T.A.; CORNEJO; D.R. and BENEDETTI, A.V. - "Effect of the Bath pH on the Electrodeposition of Nanocrystalline Pd-Co Alloys and their Magnetic Properties", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 306 (2): 199-203 (2006).

69. NOVAES, F.D.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Density Functional Theory Method for Non-Equilibrium Charge Transport Calculations: TRANSAMPA", *Brazilian Journal of Physics*, 36 (3A): 799-807 (2006).

70. NOVAES, F.D.; SILVA, A.J.R. da; SILVA, E.Z. da and FAZZIO, A. - "Oxygen Clamps in Gold Nanowires", *Physical Review Letters* 9601 (1): 016104 (2006).

71. OCAMPO, C.L.M.; MATTOS, O.R.; MARGARIT-MATTOS, I.C.P.; FABRIS, J.D.; PEREIRA, M.C.; RECHENBERG, H.R. and FARIA, D.L.A. - "Influence of Cu and Ni on the Morphology and Composition of the Rust Layer of Steels exposed to Industrial Environment", *Hyperfine Interactions* 167:739-746 (2006).

72. PACHECO-SALAZAR, D.G.; LEITE, J.R.; CERDEIRA, F.; MENESES, E.A.; LI, S.F.), AS, D.J. and LISCHKA, K. – "Photoluminescence Measurements on Cubic InGaN Layers deposited on a SiC Substrate", Semiconductor Science and Technology 21 (7): 846-851 (2006).

73. PEREIRA, T.A.S.; FREIRE, J.A.K.; FREIRE, V.N.; FARIAS, G.A.; SCOLFARO, L.M.R.; LEITE, J.R. and SILVA, E.F.C. - "Large Image Potential Effects in $Si/SrTiO_3$ and Si/HfO_2 Two-Dimensional

Quantum Well Structures", *Applied Physics Letters* 88 (24): 242114 (2006).

74. PONTES, R.B.; NOVAES, F.D.; FAZZIO, A. and SILVA, A.J.R. da - "Adsorption of Benzene-1,4-dithiol on the Au(111) Surface and its possible Role in MolecularConductance", *Journal of the American Chemical Society*, 128 (28): 8996-8997(2006).

75. SANCHEZ, M.A.E.; BRITO, G.E.S.; FANTINI, M.C.A. ; GOYA, G.F. and MATOS, J.R. - "Synthesis and Characterization of $LiFePO_4$ prepared by sol-gel Technique", *Solid State Ionics* 177 (5-6): 497-500 (2006).

76. SANTOS, M.C. do - "Electronic Properties of Acenes: Oligomer to Polymer Structure", *Physical Review B* 7404 (4): 5426-5426 (2006).

77. SCHMIDT, T.M.; ARANTES, J.T. and FAZZIO, A. - "First Principles Calculations of As Impurities in the Presence of a 90 degrees Partial Dislocation in Si", *Brazilian Journal of Physics*, 36 (2A): 261-263 (2006).

78. SCHMIDT, T.M.; VENEZUELA, P.; ARANTES, J.T. and FAZZIO, A. - "Electronic and Magnetic Properties of Mn-Doped InP Nanowires from First Principles", *Physical Review B*, 7323 (23): 235330 (2006).

79. SILVA, A.J.R. da; FAZZIO, A.; Santos R.R. dos and OLIVEIRA, L.E. - "Effects of Disorder on the Exchange Coupling in (Ga,Mn) As Diluted Magnetic Semiconductors", *Brazilian Journal of Physics* 36 (3B): 813-816 (2006).

80. SILVA, E.C.F.; HOFFMAN, D.; HOOD, A. NGUYEN, B.M.; DELAUNAY, P.Y. and RAZEGHI, M. - "Influence of Residual Impurity Background on the Nonradiative Recombination Processes in High Purity InAs/GaSb Superlattice Photodiodes", *Applied Physics Letters* 89 (24): 243517 (2006).

81. SILVA, E.Z. da; NOVAES, F.D.; SILVA, A.J.R. da and FAZZIO, A. - "Gold Nanowires and the Effect of Impurities", *Nanoscale Research Letters* 1, 91 (2006).

82. SILVA, L.B. da; FAGAN, S.B.; MOTA, R. and FAZZIO, A. - “Silicon Adsorption in Defective Carbon Nanotubes: a First Principles Study”, *Nanotechnology*, 17 (16): 4088-4091 (2006).

83. SOTOMAYOR, N.M.; NETO, J.F.D. and GUSEV, G.M. - “Memory Effects in Backscattering of Two-Dimensional Electrons in Corrugated Systems”, *Brazilian Journal of Physics* 36 (2A): 340-342 (2006).

84. SOUZA NETO, N.M. de ; RAMOS, A.Y ; TOLENTINO, H.C.N.; MARTINS, A. and SANTOS, A.D. dos - “Depth-Dependent Chemical and Magnetic Local Orders in Thin Magnetic Films”, *Applied Physics Letters* 89 (11): 111910 (2006).

85. SOUZA, J.A. and JARDIM, R.F. - “Evidence of Hopping of Charge Carriers in the Clustered state of Manganites”, *Journal of Non-Crystalline Solids* 352 (32-35): 3725-3728 (2006).

86. VIANA, J.H.M.; COUCEIRO, P.R.C.; PEREIRA, M.C. and RECHENBERG, H.R. - “Occurrence of Magnetite in the Sand Fraction of an Oxisol in the Brazilian Savanna Ecosystem, developed from a Magnetite-Free Lithology”, *Australian Journal of Soil Research* 44 (1): 71-83 (2006).

87. VIANI, L. and SANTOS, M.C. do - “Comparative Study of Lower Fullerenes doped with Boron and Nitrogen”, *Solid State Communications* 138 (10-11): 498-501 (2006).

88. WANG, R.F.; NISOLI, C.; FREITAS, R.S.; LI, J.; McCONVILLE, W.; COOLEY, B.J.; LUND, M.S.; SAMARTH, N.; LEIGHTON, C.; CRESPI, V.H. and SCHIFFER, P. - “Artificial 'Spin Ice' in a Geometrically frustrated Lattice of Nanoscale Ferromagnetic Islands”, *Nature* 439 (7074): 303-306 (2006).

89. ZANELLA I; FAZZIO, A. and SILVA, A.J.R. da - “C59Si on the Monohydride Si(100): H-(2 x 1) Surface”, *Journal of Physical Chemistry B* 110 (22): 10849-10854 (2006).

90. ZAPF, V.S.; ZOCCO, D. ; HANSEN, B.R.; JAIME, M.; HARRISON, N.; BATISTA, C.D. ; KENZELMANN, M.; NIEDERMAYER, C.; LACERDA, A. and PADUAN-Filho, A. - “Bose-Einstein Condensation of S=1 Nickel Spin Degrees of Freedon in $NiCl_2$-$_4SC(NH_2)_2$, *Physical Review Letters* 96 (7): 077204 (2006).

5.4 Trabalhos Submetidos à Publicação:

1. ALMEIDA, F.J.M.; MARTINELLI, J.R. and PARTITI, C.S.M. - "Characterization of Iron Glasses prepared by Microwave Heating", *Journal of Non-Crystalline Solids* (2006).

2. BAO, W.; MAO, Z.Q.; ZHOU, M.; HOOPER, J.; LYNN, J.W.; FREITAS, R.S.; SCHIFFER, P.; LIU, Y.; YUAN H.Q. and SALAMON, M. - "Magnetic Transition and Magnetic Structure of $Sr_4Ru_3O_{10}$", *Physical Review Letters* (2006).

3. BERQUÓ, T.S.; IMBERNON, R.A.L.; FRANCO, D.R.; TOLEDO, M.C. and PARTITI, C.S.M. - "Low Temperature Magnetism and Mössbauer Spectroscopy Study from Natural Goethite", *Physics and Chemistry of Minerals* (2006).

4. CORNEJO, D.R.; NOCE, R.D.; BARELLI, N.; SUMODJO, P.T. and BENEDETTI, A.V. - "Magnetization Reversal in Isotropic Nanocrystalline $Pd_{80}Co_{20}$ Alloy Films obtained by Electrodeposition", *Journal of Physics - D (Applied Physics)* (2006).

5. DAS, T.K. and CANUTO, S. - "Accurate Computation of Potential Matrix Elements for Use with Potential Harmonics Expansion Method Including Application to Bose-Einstein Condensation", *Journal of Computational Physics* (2006).

6. GAMA, L.; PADRÓN-HERNÁNDEZ, E., CORNEJO, D.R.; COSTA, A.A.; REZENDE, S.M.; KIMINAMI, R.H.G.A. and COSTA, A.C.F.M. - "Magnetic and Structural Properties of Nanosize Ni-Zn-Cr Ferrite Particles Synthesized by Combustion Reaction", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (2006).

7. MARQUES, M.; TELES, L. K.; FERREIRA, L. G.; SCOLFARO, L.M.R.; FURTHMÜLLER, J. and BECHSTEDT, F..- "Energy Gap and Bond Lengths of $Al_x\ Ga_y\ In_{1-x-y}\ N$, $Al_x\ Ga_y\ In_{1-x-y}\ P$ and $Al_x\ Ga_y\ In_{1-x-y}\ As$ Quaternary Alloys", Physica Status Solidi (c) (2006).

8. OTERO, X.L.; FERREIRA, T.O.; VIDAL-TORRADO, P.; PARTITI, C.S.M.; SOUZA Júnior, V. and MACÍAS, F. - "Geochemistry of Manganese and Iron in Soils and Sediments in a Mangrove System, Island of Pai Matos, Cananéia (SP), Brazil", *Chemical Geology* (2006).

9. RIBEIRO JR., M.; SCOLFARO, L.M.R.; TELES, L.K.; MARQUES, M.; and FERREIRA, L.G. - "Magnetic and Electronic Properties of

Transition Metal Nitrides Strained Layers", Physica Status Solidi (c) (2006).

5.5 Trabalhos Aceitos para Publicação:

1. ASSALI, L.V.C.; LARICO, R.; MACHADO, W.V.M. and JUSTO, J.F. - "Cobalt in Diamond: an Ab Initio Investigation", *Diamond and Related Materials* (2006).

2. BECHTOLD, I.H.; BATALIOTO, F.; THIEGHI, L.T.; HONDA, B.S.I.; POJAR, M.; SCHOENMAKER, J.; SANTOS, A.D.; ZUCOLOTTO, V.; BALOGH, D.T.; OLIVEIRA JR, O.N. and OLIVEIRA, E.A. - "Transitions in the orientational order of liquid crystals induced by periodic patterned substrates", *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids and Related Interdisciplinary Topics* (2006).

3. CAMPOS, M.F.; NEIVA, A.C.; ROMERO, S.A.; MURAKAMI, R.K.; RECHENBERG, H.R. and MISSELL, F.P. - "The $(SmZr)Co_3$ Phase in $Sm(CoFeCuZr)_x$ Magnets", *IEEE Transactions on Magnetics* (2006).

4. CAMPOS, M.F.; ROMERO, S.A.; NEIVA, A.C.; TROTA-FILHO, J.; LIDIZIO, L.R.; RECHENBERG, H.R. and MISSELL, F.P. - "Zr-Frich Phases in $Sm(CoFeCuZr)_x$ Magnets", *Materials Science Forum* (2006).

5. DEACON, R.S.; NICHOLAS, R.J.; SHIELDS, P.A. and HENRIQUES, A.B. - "Longitudinal Magnetophonon Resonances in Strongly coupled InAs/GaSb Superlattices", *Physical Review B* (2006).

6. DUARTE, E.I.; ITRI, R.; LIMA JÚNIOR, E.; BAPTISTA, M.S.; BERQUÓ, T. S. and GOYA, G.F. - "Magnetic Properties of Ferrihydrite Nanoparticles Synthesized from Reverse Micelles", *Nanotechnology* (2006).

7. ERRICO, L.A.; RENTERÍA, M. and PETRILLI, H.M. - "Augmented Wave Ab Initio EFG Calculations some Methodological Warnings", *Physica B* (2006).

8. FILETI, E.E.; GEORG, H.C.; COUTINHO, K. and CANUTO, S. - "Isotropic and Anisotropic Chemical Shifts in Liquid Water: A

Sequential QM/MM Study", *Journal of Brazilian Chemical Society* (2006).

9. GAMA, L.; DINIZ, A., COSTA, A.C.F.M.; REZENDE, S.M.; AZEVEDO, A. and CORNEJO, D.R. - "Magnetic Properties of Nanocrystalline Ni-Zn Ferrites doped with Samarium", *Physica B - Condensed Matter* (2006).

10. GICH, M.; FRONTERA, C.; ROIG, A.; TABOADA, E.; MOLINS, E.; RECHENBERG, H.R.; ARDISSON, J.D.; MACEDO, W.A.A.; RITTER, C.; HARDY, V.; SORT, J.; SKUMRYEV, V. and NOGUES, J. - "High and Low-Temperature Crystal and Magnetic Structures of Epsilon-Fe_2O_3 and their Correlation to its Magnetic Properties", *Chemistry of Materials* (2006).

11. HENRIQUES, A.B.; GALGANO, G.D.; DÍAZ, B.; RAPPL, P.H.O., and ABRAMOF, E. - "Exchange Interaction Effects on the Optical Properties of EuxPb1-xTe", *American Institute of Physics Conference Proceedings* (2006).

12. HENRIQUES, A.B.; MANFRINI, M.A.; GALGANO, G.D.; DÍAZ, B.; RAPPL, P.H.O., and ABRAMOF, E. - "Magnetic Circular Dichroism in EuTe in the Ferromagnetic Order", *International Journal of Modern Physics B* (2006).

13. HENRIQUES, A.B.; MANFRINI, M.A.; RAPPL, P.H.O. and ABRAMOF, E. - "Modeling the Dichroic Absorption Band-Edge and Light-Induced Magnetism in Europium Chalcogenides", *Physical Review B* (2006).

14. ISOTANI, S.; WATARI, K.; MIZUKAMI, A.; BONVENTI, W. ITO, A.S. - "UV Optical Absorption Spectra Analysis of Spodumene Crystals from Brazil", *Physica B-Condensed Matter* 391 (2): 322-330 (2007).

15. JUSTO, J.F.; MACHADO, W.V.M. and ASSALI, L.V.C. - "Electronic and Magnetic Properties of Mn and Fe Impurities in III - Nitride Semiconductors", *Diamond and Related Materials* (2006).

16. JUSTO, J.F.; MENEZES, R.D. and ASSALI, L.V.C. - "Stability and Plasticity of Silicon Nanowires: The Role of Wire Perimeter", *Physical Review B* (2006).

17. LINO, A.T.; BORGES, P.D.; SCOLFARO, L.M.R.; RODRIGUES, S.C.P. and SILVA Jr., E.F. da - "Optical Properties and Carrier

Effective Masses of Rutile SnO_2 as obtained from Full Relativistic Ab Initio Calculations", *Proceedings of the 28th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS-28)*, Vienna, Áustria (2006).

18. MARQUES, M.; FERREIRA, L. G.; TELES, L. K.; SCOLFARO, L. M. R.; FURTHMÜLLER, J. and BECHSTEDT, F. - "Ab Initio Study of GaN/Mn_x $Ga_{1-x}N$ Digital Heterostructure", *Proceedings of the 28th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS-28)*, Vienna, Áustria (2006).

19. MARQUES, M.; TELES, L.K.; FERREIRA, L.G.; SCOLFARO, L.M.R.; FURTHMÜLLER, J.; e BECHSTEDT, F.- "Energy Gap and Bond Lengths of Al_x Ga_y In_{1-x-y} N, Al_x Ga_y In_{1-x-y} P and Al_x Ga_y In_{1-x-y} As Quaternary Alloys", Physica Status Solidi (c) (2006).

20. MARTINS, A.; FANTINI, M.C.A.; SOUZA NETO, N.M.; RAMOS, A.Y. and SANTOS, A.D. - "Alternate Monatomic Layer Sputter Deposition of FCT (L10-type) ordered FePt and CoPt Films", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (2006).

21. MARTINS, A.; SOUZA NETO, N.M.; FANTINI, M.C.A.; SANTOS, A.D.; PRADO, R.J. and RAMOS, A.Y. - "X-ray Absorption Spectroscopy Study of FePt Thin Films", *Journal of Applied Physics* (2006).

22. MARTINS, T.B. and RECHENBERG, H.R. - "Antiferromagnetic $TiFe_2$ in applied Fields: Experiment and Simulation", *Hyperfine Interactions* (2006).

23. MENEZES, R.D.; JUSTO, J.F. and ASSALI, L.V.C. - "Energetic of Silicon Nanowires: a Molecular Dynamics Investigation", *Physica Status Solidi A* (2006).

24. MOTA, R.; FAGAN, S.B. and FAZZIO, A. - "First Principles Study of Titanium-Coated Carbon Nanotubes as Sensors for Carbon Monoxide Molecules", *Surface Science* (2006).

25. MURAKAMI, R.K.; RECHENBERG, H.R.; Villas-Boas, V. and MCCALLUM, R.W. - "(Pr,Nd)-Fe-B Nanocrystalline Magnetic Materials with TiC Additons", *Journal of Applied Physics* (2006).

26. NOCE, R.D.; BARELLI, N.; CORNEJO, D.R., SUMODJO, P.T. and BENEDETTI, A.V. - "Effect of the Bath pH on the Electrodeposition

of Nanocrystalline Pd-Co Alloys and their Magnetic Properties", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (2006).

27. OCAMPO, L.M.; MATTOS, O.R.; MARGARIT-MATTOS, I.C.P.; FABRIS, J.D.; PEREIRA, M.C.; RECHENBERG, H.R. and FARIA, D.L.A. - "Influence of Cu and Ni on the Morphology and Composition of the Rust Layer of Steels exposed to Industrial Environment", *Hyperfine Interactions* (2006).

28. PRADO, L.M.A.; SCHOENMAKER, J.; SANTOS, A.D.; FOURNIER, T. and SOUCHE, Y. - "Magneto-Optical Scanning Near-Field Microscope", *Physica Status Solidi A-Applied Research* (2006).

29. RECHENBERG, H. R.; ALVES, C.R.; AQUINO, R.; DEPEYROT, J.; COTTA, T.A.P.; SOUSA, M.H.; TOURINHO, F.A. and GOYA, G.F. - "Surface Spin Freezing of Ferrite Nanoparticles evidenced by Magnetization Measurements", *Journal of Applied Physics* (2006).

30. RIBEIRO Jr., M. ; MARQUES, M. ; SCOLFARO, L.M.R.; TELES, L.K. and FERREIRA, L.G. - "Theoretical Studies of Magnetic Properties of VN, CrN, MnN, FeN, and CoN under Strain", *Proceedings of the 28th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS-28)*, Vienna, Áustria (2006).

31. RIBEIRO Jr., M.; SCOLFARO, L.M.R.; TELES, L.K.; MARQUES, M. and FERREIRA, L.G. - "Magnetic and Electronic Properties of Transition Metal Nitrides Strained Layers", *Physica Status Solidi* (c) (2006).

32. RODRIGUES, S.C.P.; d'EURYDICE, M.N.; SIPAHI, G.M.; SCOLFARO, L.M.R. e SILVA Jr., E.F. da - "White Light Emission from ρ-doped Quaternary (AlInGa)N-based Superlattices: Theoretical Calculation for the Cubic Phase, *Journal of Applied Physics* (2006).

33. SCHOENMAKER, J.; SANTOS, A.D.; SOUCHE, Y.; SEABRA, A.C. and SAMPAIO, L.C. - "Imaging of Domain Wall Motion in Small Magnetic Particles through Near-Field Microscopy", *Applied Physics Letters* (2006).

34. SILVA, C.C.; LEITE ALVES, H.W. and SCOLFARO, L.M.R. - "Frequency Dependence of the Dielectric Constants and of the Reflectivity for HfO_2 and ZrO_2 from First Principles Calculations",

Proceedings of the 28th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS-28), Vienna, Áustria (2006).

35. SOUZA NETO, N.M.; RAMOS, A.Y.; TOLENTINO, H.C.N.; MARTINS, A. and SANTOS, A.D. - "Depth-Dependent Chemical and Magnetic Local order in Thin Magneticfilms", *Applied Physics Letters* (2006).

36. VIANA, J.H.M.; COUCEIRO, P.R.C.; PEREIRA, M.C.; FABRIS, J.D.; FILHO, E.I.F.; SCHAEFER, C.E.G.R.; RECHENBERG, H.R.; ABRAHÃO, W.A.P. and MANTOVANI, E.C. - "Occurrence of Magnetite in the Sand Fraction of an Oxisol in the Brazilian Savanna Ecosystem, developed from a Magnetite-Free Lithology", *Australian Journal of Soil Research* (2006).

5.6 Publicação de Capítulos de Livros:

1. BARRETO, R.C.; CANUTO, S.; COUTINHO, K.and GEORG, H.C. - "Molecular Polarization in Liquid Environment. In: G. Maroulis". (Org.). In: *Trends and Perspectives in Modern Computational Science.: Brill Academic Publishers* **6**, 80-90 (2006).

2. FAZZIO, A. and SILVA, A.J.R. da - "Nanotecnologia". In: *Ciências Físicas no Brasil*. HAMBURGER, E.W. (Org.). Ed. Livraria da Física (2006).

3. FAZZIO, A. and SILVA, A.J.R. da - "Simulação Computacional de Materiais". In: E.W. Hamburger (Org.). In: *Ciências Físicas no Brasil*. HAMBURGER, E.W. (Org.). Ed. Livraria da Física (2006).

5.7 Publicação de Artigo em Revista:

1. PARTITI, C.S.M.; JORGE, F.O.; TABACNIKS, M.H.; MARTINS, C.C.; MAHIQUES, M.M. e FIGUEIRA, R.C.L. - "Marcas da Ocupação Humana e Industrial". *Ciência Hoje*, Rio de Janeiro/RJ, p.54-55 (2006).