

A N E X O

06

SOLICITAÇÃO DE CREDENCIAMENTO

Processo Nº 08.1.01707.43.3. Resumo obtido em 06.05.2024

Docente: Sylvio Roberto Accioly Canuto **Nº USP** 93381
Departamento: Física Geral
Unidade: Instituto de Física
Regime: RDIDP **Categoria:** MS-6
Estágio de experimentação:
Credenciado até:
Situação Aguardando Submissão à Congregação

PARECERES EMITIDOS

Emitido **Marcos Nogueira Martins**

A trajetória do Prof. Canuto mostra com muita clareza que, mesmo durante o exercício de funções de direção ou de avaliação, sua produção científica e acadêmica manteve-se profícua e relevante.

Considero que o convite para assumir a coordenação adjunta de área na FAPESP seja uma excelente oportunidade, tanto para o candidato, que poderá utilizar o conhecimento adquirido sobre a pesquisa na USP durante seu mandato com Pró-Reitor de Pesquisa, quanto para a FAPESP, que poderá contar com um profissional extremamente experiente e atento às questões da pesquisa no Brasil.

Tenho certeza que tal atividade não prejudicará as atividades acadêmicas do Prof. Canuto.

RESPOSTAS AO QUESTIONÁRIO

Autoavaliação do interessado sobre o desempenho de suas funções regulares.

Nos últimos 30 anos venho desenvolvendo plenamente minhas atividades acadêmicas no IFUSP, que englobam atividades de pesquisa, docência, e gestão e extensão universitária.

Histórico Profissional e distinções:

- *Pró-reitor de Pesquisa da USP (03/2018-02/2022)*
- *Membro da Academia Mundial de Ciências (The World Academy of Science), TWAS; &x2028;*
- *Ordem Nacional do Mérito Científico, categoria Comendador (2018); &x2028;*
- *Membro Titular da Academia Brasileira de Ciências (ABC), 2011; &x2028;*
- *Membro da Academia de Ciências do Estado de São Paulo (ACIESP) 2015; &x2028;*
- *Membro do Comitê de Seleção da ABC (2020-)*
- *Professor Titular, Instituto de Física da USP (1994).*
- *Bolsista de Produtividade em Pesquisa 1A do CNPq;*
- *Co-Editor-in-Chief : Spectrochimica Acta A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy (Elsevier)*
- *Membro do Conselho Superior da CAPES (2016-2018).*
- *Membro (2001-2003) e Presidente (2001-2002) do Comitê Assessor do CNPq.*
- *Coordenador de Área de Física e Astronomia da CAPES (2011-2018)*
- *Chefe do Departamento de Física Geral do IF da USP por dois mandatos (2008-2012)*
- *Presidente da Comissão de Pós-Graduação do IF da USP (1998-2001).*
- *Chefe do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica, USP (1994-1996)*
- *Chefe do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco (1990-1992)*
- *Professor Adjunto, Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco (1980-1989)*
- *Professor Titular, Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco (1989-1994)*
- *Coordenador de Pós-Graduação, DF, Universidade Federal de Pernambuco (1984-1987)*
- *Professor Colaborador Doutor, Departamento de Física da UFMG (Nov de 1979 a Ago de 1980) &x2028;*
- *Membro do Advisory Editorial Board do Chemical Physics Letters (2004-2010); &x2028;*
- *Membro do Editorial Board do International Journal of Quantum Chemistry (2001-presente); &x2028;*
- *Specialist Editor: Computer Physics Communications (1987-1990, 2002-2006); &x2028;*
- *Editor Associado do Brazilian Journal of Physics (2000-2009); &x2028;*
- *Membro do Conselho da Sociedade Brasileira de Física (2001-2003, 2009-2013); &x2028;*
- *Coordenador da área de Física Atômica e Molecular junto à SBF (dois mandatos encerrados em 2014 e mandato em curso: 2022-). &x2028;*
- *Professor homenageado na Universidade de Havana, Cuba.*
- *M. N. Saha Lecturer, 125 years, Indian Association for the Cultivation of Science, 2003*

Prêmios:

- *Co-orientador junto com Mário José de Oliveira: Menção Honrosa de Melhor Tese de Doutorado 1998: &x201c;Modelo Discreto de Solvente. Solvatocromismo no Espectro de Absorção Molecular&x201d; por Kaline Coutinho, Prêmio José Leite Lopes, Sociedade Brasileira de Física (SBF).*
- *Melhor Software Desenvolvido, categoria Mecânica Estatística: Programa DICE, autores: Kaline Coutinho e Sylvio Canuto. Oferecido pelo XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 11/2005.*

- Homenageado com Edição Especial do International Journal of Quantum Chemistry (62 artigos de cientistas de 22 países) <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/qua.v111.7/8/issuetoc>

Indicadores quantitativos:

- Livros publicados: 4
- Capítulo de livros: 13
- Edição especial de revistas internacionais: 9
- Publicações em periódicos com seletiva política editorial: 272 (ResearchGate = 297 publicações)
- Orientações concluídas: 21 mestrados, 20 doutorados, 15 pós-doutorados
- Google Scholar: Fator $h = 44$ com 7331 citações, Índice $i10 = 176$;
- Web of Science: Fator $h = 37$ com 277 publicações, 5295 citações;
- Patentes solicitadas = 0; Produtos desenvolvidos e lançados no mercado = 0; Processos otimizados implementados em empresas ou organizações sociais = 0; Empresas criadas ou apoiadas = 0
- Consultorias técnicas e científicas relevantes = 150 (estimativa, nacionais e internacionais, incluindo parecer oficial para a Comissão Nobel referente ao Prêmio Nobel de Química em 2013, Comitê Internacional do Prêmio Unesco-L'Oréal 2011-2018, Fundação Schmidt Science Fellows, Austrian Science Fund, King Saud University, Indian Association for the Cultivation of Science, etc.)

Links:

Google Scholar: <http://scholar.google.com.br/citations?user=9BaBA9IAAAAJ&hl=pt-BR>

ResearcherID: <http://www.researcherid.com/rid/C-6174-2011>

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9942-8714>

Apreciação do impacto estimado das atividades simultâneas sobre a realização do Projeto Acadêmico individual do docente. (Preenchido pelo docente se a atividade a ser desenvolvida for conhecida quando da solicitação, inclusive informando qual a atividade)

O impacto estimado será positivo, visto que exercerei, a partir de julho/2023, a atividade de Coordenador Adjunto de Área (CAD) na FAPESP, o que trará uma visão ampla da pesquisa desenvolvida na USP e no estado de São Paulo. Assim, terei plenas condições de articular grandes projetos no IFUSP e projetos multidisciplinares que envolvam outras unidades na USP.

Apreciação do impacto estimado das atividades simultâneas sobre a realização dos projetos acadêmicos do departamento e da unidade.

É indiscutível que o impacto será positivo para a realização do projeto acadêmico do departamento e do IFUSP com a nomeação do professor como Coordenador Adjunto de Área (CAD) na FAPESP a partir de julho de 2023. Essa função proporcionará uma visão abrangente da pesquisa realizada não apenas na USP, mas em todo o estado de São Paulo.

A oportunidade de exercer o papel de CAD na FAPESP oferecerá ao professor um entendimento aprofundado das diversas áreas de pesquisa e dos projetos em andamento, contribuindo significativamente para sua capacidade de articular grandes

projetos no IFUSP e colaborar em iniciativas multidisciplinares envolvendo outras unidades na USP.

Portanto, considero que essa nova responsabilidade fortalecerá a posição do professor promovendo excelência na pesquisa e colaboração interdisciplinar no âmbito do IFUSP e além.

AVALIAÇÕES DO QUESTIONÁRIO



Sylvio Roberto Accioly Canuto

Bolsista de Produtividade em Pesquisa do CNPq - Nível 1A

Endereço para acessar este CV: <http://lattes.cnpq.br/2794888963106382>

ID Lattes: **2794888963106382**

Última atualização do currículo em 01/02/2024

Professor Titular do Instituto de Física da USP. É membro Titular da Academia Brasileira de Ciências (ABC), da Academia de Ciências do Estado de São Paulo (ACIESP) e da TWAS (The World Academy of Sciences). Agraciado com a Ordem Nacional do Mérito Científico, na classe de comendador (2018). Foi o Pró-Reitor de Pesquisa da Universidade de São Paulo (Mar 2018-Feb 2022). É co-Editor-in-Chief do periódico *Spectrochimica Acta A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* (Elsevier) e membro do corpo editorial do *International Journal of Quantum Chemistry* (2001 -). Foi Coordenador da Área de Astronomia e Física (2011-2018) junto à CAPES e representante do CTC-ES (2015-2018) no Conselho Superior da CAPES. Bacharel e mestre em Física pela Universidade de Brasília e doutorado em 1979 pela Universidade de Uppsala (Suécia). Foi professor titular do Departamento de Física da UFPE (1989-1994), sendo desde 1994 professor titular do Instituto de Física da USP. Foi professor visitante em inúmeras instituições internacionais. Foi Specialist Editor do *Computer Physics Communications* em diferentes mandatos (1987-1990, 2002-2006) e membro do Corpo editorial do *Chemical Physics Letters* por dois mandatos (2004-2009) e tendo sido por 10 anos editor associado do *Brazilian Journal of Physics*. Foi chefe do Departamento de Física Geral do IFUSP (2008-2012) tendo sido chefe do Departamento de Física da UFPE (1989-1991) e chefe do departamento de Física dos Materiais do IFUSP (2004-2006). Sua especialidade está em Teoria de Muitos Corpos, Simulação Computacional e Modelagem Molecular, com ênfase no estudo de efeitos de solvente em espectroscopia e reatividade de líquidos moleculares. É autor ou co-autor de mais de 280 artigos publicados (em revistas e capítulos de livros) de circulação internacional fator $H=446$ (Google) e $i_{10}=180$, com mais de 7800 citações com índice do ResearchGate=43.98 e $H=38$. Dados do ISI: Fator $H = 39$ com mais de 5000 citações e com número médio de citações de 18,1. Suas publicações envolvem co-autorias com colaboradores de 24 países distintos e o *International Journal of Quantum Chemistry* dedicou uma edição especial em sua homenagem por ocasião de seus 60 anos. **(Texto informado pelo autor)**

Identificação

Nome

Sylvio Roberto Accioly Canuto

Nome em citações bibliográficas

CANUTO, S.;Canuto, Sylvio;CANUTO, S;Canut, Sylvio;Canuto, S.;Sylvio Canuto;S. Canuto;Cardenuto, Marcelo Hidalgo

Lattes iD

 <http://lattes.cnpq.br/2794888963106382>

Endereço

Endereço Profissional

Universidade de São Paulo, Instituto de Física,
Departamento de Física Geral.
CP 66318
Cidade Universitária
05315970 - São Paulo, SP - Brasil - Caixa-
postal: 66318
Telefone: (11) 30916983
Fax: (11) 30916831

Formação acadêmica/titulação

1975 - 1979

Doutorado em Física.
Uppsala Universitet, U.UPPSALA, Suécia.
Título: Localized Treatment of Electronic
Excitations in Atoms and Molecules, Ano de
obtenção: 1979.
Orientador: Osvaldo Goscinski.
Bolsista do(a): Conselho Nacional de
Desenvolvimento Científico e Tecnológico,
CNPq, Brasil.

1972 - 1974

Mestrado em Física.
Universidade de Brasília, UnB, Brasil.
Título: Método CNDO na Base Slater
Modificada, Ano de Obtenção: 1974.
Orientador: José David Mangueira Vianna.
Bolsista do(a): Conselho Nacional de
Desenvolvimento Científico e Tecnológico,
CNPq, Brasil.

1969 - 1971

Graduação em Física.
Universidade de Brasília, UnB, Brasil.

Pós-doutorado

1987 - 1989

Pós-Doutorado.
University of Florida, UF, Estados Unidos.
Bolsista do(a): Conselho Nacional de
Desenvolvimento Científico e Tecnológico,
CNPq, Brasil.
Grande área: Ciências Exatas e da Terra

Atuação Profissional

Universidade de São Paulo, USP, Brasil.

Vínculo institucional

1994 - Atual

Vínculo: Servidor Público, Enquadramento
Funcional: Professor titular, Carga horária: 40,
Regime: Dedicção exclusiva.

Outras informações

Professor Titular na Universidade Federal de Pernambuco no período de 1989 a jan/1994.

Atividades

11/2003 - Atual

Conselhos, Comissões e Consultoria, Instituto de Física, Departamento de Física dos Materiais e Mecânica.

Cargo ou função
Representante Titular do Departamento junto à Comissão de Pesquisa do IFUSP.

1/2003 - Atual

Outras atividades técnico-científicas , Instituto de Física, Instituto de Física.

Atividade realizada
Membro do Advisory Editorial Board do Chemical Physics Letters.

1/2002 - Atual

Outras atividades técnico-científicas , Instituto de Física, Instituto de Física.

Atividade realizada
Membro do Editorial Board do International Journal of Quantum Chemistry.

1/2002 - Atual

Outras atividades técnico-científicas , Instituto de Física, Instituto de Física.

Atividade realizada
Specialist Editor Computer Physics Communications.

1/2001 - Atual

Outras atividades técnico-científicas , Instituto de Física, Instituto de Física.

Atividade realizada
International Scientific Advisory Board: Journal of the Argentine Chemical Society.

1/1998 - Atual

Outras atividades técnico-científicas , Instituto de Física, Instituto de Física.

Atividade realizada
Editor Associado do Brazilian Journal of Physics.

2/1994 - Atual

Direção e administração, Instituto de Física,
Departamento de Física dos Materiais e
Mecânica.

Cargo ou função
Conselho Departamental.

2/1994 - Atual

Direção e administração, Instituto de Física,
Departamento de Física dos Materiais e
Mecânica.

Cargo ou função
Membro da Congregação do Instituto.

2/1994 - Atual

Pesquisa e desenvolvimento, Instituto de Física,
Departamento de Física dos Materiais e
Mecânica.

Linhas de pesquisa
Simulação computacional de líquidos
Efeitos de solventes em espectroscopia
molecular
Estrutura eletrônica de líquidos moleculares
Interação e hidratação hidrofóbica
Forças intermoleculares e ligações de
hidrogênio
Propriedades ópticas e elétricas de moléculas
Moléculas de interesse biológico

2/1994 - Atual

Ensino, Física, Nível: Pós-Graduação

Disciplinas ministradas
Mecânica Quântica I
Física Atômica e Molecular
Mecânica Quântica II
Forças Intermoleculares
Métodos Clássicos e Quânticos de Estrutura
Eletrônica de Materiais

2/1994 - Atual

Ensino, Física, Nível: Graduação

Disciplinas ministradas
Física I
Física II
Física V (Estrutura da Matéria)
Introdução a Física Atômica e Molecular
Física para Ciências Biológicas
Física Moderna

2/1994 - Atual

Conselhos, Comissões e Consultoria, Instituto de Física, Departamento de Física dos Materiais e Mecânica.

Cargo ou função
Membro da Congregação do IFUSP.

2/1994 - Atual

Conselhos, Comissões e Consultoria, Instituto de Física, Departamento de Física dos Materiais e Mecânica.

Cargo ou função
Membro do Conselho do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica do IFUSP.

2/2004 - 2/2006

Direção e administração, Instituto de Física, Departamento de Física dos Materiais e Mecânica.

Cargo ou função
Chefe do Departamento.

12/1997 - 12/1999

Direção e administração, Instituto de Física, Departamento de Física dos Materiais e Mecânica.

Cargo ou função
Presidente da Comissão de Pós-Graduação do Instituto de Física da USP.

12/1997 - 12/1999

Direção e administração, Instituto de Física, Departamento de Física dos Materiais e Mecânica.

Cargo ou função
Membro da Câmara de Avaliação da Pró-reitoria de Pós-graduação.

12/1997 - 12/1999

Direção e administração, Instituto de Física, Departamento de Física dos Materiais e Mecânica.

Cargo ou função
Membro do Conselho de Pós-graduação.

12/1997 - 12/1999

Conselhos, Comissões e Consultoria, Instituto de Física, Departamento de Física dos Materiais e Mecânica.

Cargo ou função
Presidente da Comissão de Pós-Graduação do IFUSP.

12/1997 - 12/1999

Conselhos, Comissões e Consultoria, Instituto de Física, Departamento de Física dos Materiais e Mecânica.

Cargo ou função
Membro do Conselho de Pós-Graduação da USP.

12/1997 - 12/1999

Conselhos, Comissões e Consultoria, Instituto de Física, Departamento de Física dos Materiais e Mecânica.

Cargo ou função
Membro do Conselho Técnico Administrativo do IFUSP.

12/1997 - 12/1999

Conselhos, Comissões e Consultoria, Instituto de Física, Departamento de Física dos Materiais e Mecânica.

Cargo ou função
Membro da Câmara de Avaliação da Pró-Reitoria de Pós-graduação da USP.

Universidade Federal de Pernambuco, UFPE, Brasil.

Vínculo institucional

1989 - 1994

Vínculo: Servidor público ou celetista,
Enquadramento Funcional: Professor titular,
Carga horária: 40, Regime: Dedicção exclusiva.

Vínculo institucional

1983 - 1989

Vínculo: Servidor público ou celetista,
Enquadramento Funcional: Professor Adjunto,
Carga horária: 40, Regime: Dedicação exclusiva.

Vínculo institucional

1980 - 1983

Vínculo: Professor Visitante, Enquadramento Funcional: Professor Visitante, Carga horária: 40, Regime: Dedicação exclusiva.

Atividades

8/1980 - 8/1994

Pesquisa e desenvolvimento, Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Departamento de Física.

Linhas de pesquisa
Física Atômica e Molecular

8/1980 - 8/1994

Ensino, Física, Nível: Graduação

Disciplinas ministradas
Mecânica Quântica 1
Mecânica Quântica 2
Física I
Física IV
Mecânica Clássica 1
Mecânica Clássica 2

8/1980 - 8/1994

Ensino, Física, Nível: Pós-Graduação

Disciplinas ministradas
Teoria Quântica 1
Teoria Quântica 2
Teoria de Perturbação de Muitos Corpos 1
Teoria de perturbação de muitos Corpos 2
Física Atômica e Molecular
Método Hartree-Fock para átomos, moléculas e sólidos
Mecânica Clássica
Simulação Computacional de Líquidos

8/1990 - 7/1992

Direção e administração, Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Departamento de Física.

Cargo ou função
Chefe de Departamento.

8/1990 - 7/1992

Direção e administração, Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Departamento de Física.

Cargo ou função
Membro do Conselho Departamental.

7/1984 - 6/1987

Direção e administração, Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Departamento de Física.

Cargo ou função
Coordenador de pós-graduação.

7/1982 - 6/1987

Direção e administração, Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Departamento de Física.

Cargo ou função
Membro do Conselho Departamental.

7/1982 - 6/1984

Direção e administração, Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Departamento de Física.

Cargo ou função
Vice-coordenador de pós-graduação.

6/1980 - 5/1982

Direção e administração, Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Departamento de Física.

Cargo ou função
Coordenador do Setor de Cálculo Numérico.

Universidade Federal de Minas Gerais, UFMG, Brasil.

Vínculo institucional

1979 - 1980

Vínculo: Professor Visitante, Enquadramento Funcional: Professor Adjunto, Carga horária: 40, Regime: Dedicção exclusiva.

Atividades

11/1979 - 7/1980

Pesquisa e desenvolvimento, Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Física.

11/1979 - 7/1980

Ensino, Física, Nível: Pós-Graduação

Disciplinas ministradas
Mecânica Clássica

Universidade de Uppsala, UU, Suécia.

Vínculo institucional

1975 - 1979

Vínculo: Bolsista, Enquadramento Funcional:
Estudante de Doutorado

Universidade de Brasília, UnB, Brasil.

Vínculo institucional

1972 - 1974

Vínculo: Celetista, Enquadramento Funcional:
Professor

Linhas de pesquisa

1.

Simulação computacional de líquidos

2.

Efeitos de solventes em espectroscopia
molecular

3.

Estrutura eletrônica de líquidos moleculares

4.

Interação e hidratação hidrofóbica

5.

Forças intermoleculares e ligações de
hidrogênio

6.

Propriedades ópticas e elétricas de moléculas

7.

8.

Física Atômica e Molecular

9.

Física Atômica e Molecular

Projetos de pesquisa

2012 - Atual

Nucleo de Apoio à Pesquisa da USP

Descrição: Apoio da Pró-reitoria de Pesquisa da USP por 10 anos para integração multidisciplinar.

Situação: Em andamento; Natureza: Pesquisa.

Integrantes: Sylvio Roberto Accioly Canuto - Coordenador / Antonio Martins Figueiredo Neto - Integrante.

2009 - 2013

Projeto INCT de Fluido Complexos

Descrição: Estudos por simulação computacional de propriedades moleculares em meio líquido complexo com ênfase em sistemas de interesse biológico e organizados.

Situação: Em andamento; Natureza: Pesquisa.

Integrantes: Sylvio Roberto Accioly Canuto - Integrante / Coutinho, Kaline - Integrante / Antonio M. Figueiredo - Coordenador.

2009 - 2013

Projeto Rede Nanobiotec-Brasil

Descrição: Estudos por simulação computacional de moléculas de interesse biológico e pontencial de aplicações.

Situação: Em andamento; Natureza: Pesquisa.

Integrantes: Sylvio Roberto Accioly Canuto - Integrante / P Chaudhuri - Integrante / T. L. Fonseca - Integrante / Coutinho, Kaline - Integrante / Georg, H. C. - Integrante / Osvaldo N. Oliveira - Coordenador.

2007 - 2010

CAPES/GRICES:

Descrição: Programa de cooperação entre o Grupo de Física Matemática do Prof. Benedito José Costa Cabral na Universidade de Lisboa, Portugal e o grupo de pesquisa do Prof. Sylvio Canuto no Instituto de Física da Universidade de São Paulo..

Situação: Em andamento; Natureza: Pesquisa.

Alunos envolvidos: Doutorado: (1) .

Integrantes: Sylvio Roberto Accioly Canuto -
Coordenador / B J Costa Cabral - Integrante / R
C Barreto - Integrante / Coutinho, Kaline -
Integrante.

Financiador(es): Coordenação de
Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior -
Cooperação.

2005 - 2010

CAPES/PROCAD:

Descrição: Equipe Líder: USP - Sylvio Canuto
(Coordenador) Equipe Associada: UFG - Marcos
Antônio de Castro Montante: R\$ 124.643,20
Período de Vigência: 29 de dezembro de 2005
a 28 de dezembro de 2009.

Situação: Em andamento; Natureza: Pesquisa.
Alunos envolvidos: Graduação: (0) /
Especialização: (0) / Mestrado acadêmico: (0) /
Mestrado profissional: (0) / Doutorado: (0) .

Integrantes: Sylvio Roberto Accioly Canuto -
Coordenador / M A de Castro - Integrante / T.
L. Fonseca - Integrante / Coutinho, Kaline -
Integrante.

Financiador(es): Coordenação de
Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior -
Auxílio financeiro.

2003 - 2006

Projeto Temático FAPESP:

Descrição: Coordenador: Sylvio Canuto
Processo nº 02/01457-0 Montante: R\$
252.170,55 Período de Vigência: 01/03/2003 a
28/02/2006.

Situação: Concluído; Natureza: Pesquisa.
Alunos envolvidos: Graduação: (2) /
Especialização: (0) / Mestrado acadêmico: (4) /
Mestrado profissional: (0) / Doutorado: (3) .

Integrantes: Sylvio Roberto Accioly Canuto -
Coordenador / Antonio Carlos Borin -
Integrante / Coutinho, Kaline - Integrante.

Financiador(es): Fundação de Amparo à
Pesquisa do Estado de São Paulo - Auxílio
financeiro.

Número de produções C, T & A: 38

Membro de corpo editorial

2016 - Atual

Periódico: SPECTROCHIMICA ACTA PART A-
MOLECULAR AND BIOMOLECULAR
SPECTROSCOPY

2016 - Atual

Periódico: SPECTROCHIMICA ACTA PART A-
MOLECULAR AND BIOMOLECULAR
SPECTROSCOPY

2010 - Atual

Periódico: Current Physical Chemistry

2005 - 2014

Periódico: Research Letters in Physics and Chemistry

2004 - Atual

Periódico: Journal of the Argentine Chemical Society

2003 - 2009

Periódico: Chemical Physics Letters

2002 - Atual

Periódico: International Journal of Quantum Chemistry

2002 - 2006

Periódico: Computer Physics Communications

2001 - Atual

Periódico: Advances in Physical Organic Chemistry

1998 - 2008

Periódico: Brazilian Journal of Physics

1987 - 1990

Periódico: Computer Physics Communications

Membro de comitê de assessoramento

2000 - Atual

Agência de fomento: Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado da Bahia

1998 - 2014

Agência de fomento: Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ

1990 - 2014

Agência de fomento: Fundação de Amparo à Ciência e Tecnologia do Estado de Pernambuco

1990 - 2014

Agência de fomento: Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais

1990 - Atual

Agência de fomento: Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul

1985 - 2014

Agência de fomento: Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo

1980 - 2014

2015 - Atual

Agência de fomento: Coordenação de
Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior

2011 - Atual

Agência de fomento: Coordenação de
Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior

1980 - 2014

Agência de fomento: Coordenação de
Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior

Revisor de periódico

1980 - Atual

Periódico: Chemical Physics Letters (Print)

1977 - Atual

Periódico: International Journal of Quantum
Chemistry

1985 - Atual

Periódico: The Journal of Chemical Physics

1980 - 2012

Periódico: Journal of Molecular Structure.
Theochem (Print)

2000 - Atual

Periódico: The Journal of Physical Chemistry. A

2010 - Atual

Periódico: PCCP. Physical Chemistry Chemical
Physics (Print)

1995 - Atual

Periódico: Physical Review. A

1990 - Atual

Periódico: Brazilian Journal of Physics
(Impresso)

1997 - Atual

Periódico: Advances in Quantum Chemistry

1990 - Atual

Periódico: Theoretical Chemistry Accounts
(Print)

1995 - Atual

1995 - Atual

Periódico: Journal of Physical Chemistry. B

1995 - Atual

Periódico: Chemical Physics (Print)

2000 - Atual

Periódico: Journal of the Brazilian Chemical Society (Impresso)

1997 - Atual

Periódico: Journal of the American Chemical Society (Print)

1995 - Atual

Periódico: Journal of Molecular Structure (Print)

2005 - Atual

Periódico: Journal of Computational Chemistry

2013 - Atual

Periódico: Computational and Theoretical Chemistry

2012 - Atual

Periódico: Journal of Physical Chemistry Letters

2012 - Atual

Periódico: Journal of Chemical Theory and Computation

1995 - Atual

Periódico: Physical Review Letters (Print)

1987 - Atual

Periódico: Computer Physics Communications

2005 - Atual

Periódico: European Journal of Physics (Print)

2010 - Atual

Periódico: ChemPhysChem (Print)

2005 - Atual

Periódico: Journal of Molecular Liquids (Print)

2005 - Atual

Periódico: Journal of Molecular Modeling (Print)

1997 - Atual

2015 - Atual

Periódico: SPECTROCHIMICA ACTA PART A-
MOLECULAR AND BIOMOLECULAR
SPECTROSCOPY

2015 - Atual

Periódico: JOURNAL OF MOLECULAR
MODELING

Áreas de atuação

1.

Grande área: Ciências Exatas e da Terra / Área:
Física / Subárea: Física Atômica e Molecular.

2.

Grande área: Ciências Exatas e da Terra / Área:
Física / Subárea: Física da Matéria Condensada.

3.

Grande área: Ciências Exatas e da Terra / Área:
Física / Subárea: Física da Matéria
Condensada/Especialidade: Simulação
Computacional.

4.

Grande área: Ciências Exatas e da Terra / Área:
Química / Subárea: Química Quântica.

5.

Grande área: Ciências Exatas e da Terra / Área:
Física / Subárea: Espectroscopia Molecular.

Idiomas

Inglês

Compreende Bem, Fala Bem, Lê Bem, Escreve Bem.

Espanhol

Compreende Bem, Fala Bem, Lê Bem, Escreve Bem.

Sueco

Compreende Razoavelmente, Fala Razoavelmente, Lê Razoavelmente, Escreve Pouco.

Prêmios e títulos

2018

Membro da Academia Mundial de Ciências (The World Academy of Sciences), TWAS.

2018

Ordem Nacional do Mérito Científico, Comendador.

2013

Membro da Academia de Ciências do estado de São Paulo, ACIESP.

2011

Edição Especial dedicado a celebrar os 60 anos com 62 artigos de 22 países, International Journal of Quantum Chemistry.

2011

Membro da Academia Brasileira de Ciências, ABC.

2008

Professor Patrono, Formandos Bachareis e Licenciados em Física no IFUSP.

2007

Professor Paraninfo, Formandos Bachareis em Física no IFUSP.

2006

Profesor Invitado, Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas de Havana, Cuba.

2005

Melhor Software Desenvolvido - Categoria Mecânica Estatística: Programa DICE; autores: Kaline Coutinho e Sylvio Canuto, XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica.

2005

Melhor Trabalho: Utilização de Teoria de Perturbação Termodinâmica para Estudar Processos de Dissociação de Aglomerados em Solução Aquosa; autores: Tatiane F. de Moraes, Kaline Coutinho e Sylvio Canuto, XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica.

2005

Professor Homenageado, Formandos Bachareis em Física no IFUSP.

2002

M N Saha Memorial Lecture, Indian Association for the Cultivation of Sciences, India.

1998

Menção Honrosa na Melhor Tese de Doutorado (Kaline Coutinho, Mário Jose de Oliveira e Sylvio Canuto), Sociedade Brasileira de Física.

Produção bibliográfica

Citações

Web of Science

Total de trabalhos:277

Total de citações:4570

Canuto S. Data: 01/02/2024

Outras

Total de trabalhos:356

Total de citações:7868

Sylvio Canuto Dados do Google Acadêmico Data: 01/02/2024

Artigos completos publicados em periódicos

Ordenar por

Ordem Cronológica



1.

DAMASCENO, MARCUS V.A. ; CUNHA, ANTÔNIO R. ; Provasi, Patrício F. ; PAGOLA, GABRIEL I. ; SIQUEIRA, MARCELO ; [MANZONI, VINÍCIUS](#) ; GESTER, RODRIGO ; **Canuto, Sylvio** . Modulation of the NLO properties of p-coumaric acid by the solvent effects and proton dissociation. JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS **JCR**, v. 394, p. 123587, 2024.

2.

MEDEIROS, FLÁVIO SOARES ; OLIVEIRA, KELSON M.T. ; **Canuto, Sylvio** ; [Chaudhuri, Puspitapallab](#) . A quantum chemical investigation of the interaction of perfluoropropionic acid with monoethanolamine and sulfuric acid in the atmosphere. Computational and Theoretical Chemistry **JCR**, v. 1233, p. 114485, 2024.

3.

RAMOS, TÁRCIUS N. ; FRANCO, LEANDRO R. ; [Silva, Daniel L.](#) ; **Canuto, Sylvio** . Calculation of the one- and two-photon absorption spectra of water-soluble stilbene derivatives using a multiscale QM/MM approach. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **JCR**, v. 159, p. 024309-1-024309-12, 2023. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#)™ 1

4.

FONSECA, SÁVIO ; DOS SANTOS, NEIDY S. S. ; DA CUNHA, ANTONIO R. ; **Canuto, Sylvio** ; Provasi, Patrício F. ; ANDRADE-FILHO, TARCISO ; GÉSTER, RODRIGO . The Solute Polarization and Structural Effects on the Nonlinear Optical Response of Based Chromone Molecules. CHEMPHYSICHEM **JCR**, v. 24, p. e202300060-1-e202300060-11, 2023. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#)™ 2 | [SCOPUS](#) 3

5.

MANZONI, VINÍCIUS ; OROZCO-GONZALEZ, YOELVIS ; PEON, JORGE ; **Canuto, Sylvio** . Theoretical study of the absorption and emission spectra of 1,2-Bis(9-anthryl)acetylene in cyclohexane and acetonitrile. CHEMICAL PHYSICS LETTERS **JCR**, v. 830, p. 140775-140775-6, 2023. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) ¹

6.

GESTER, RODRIGO ; SIQUEIRA, MARCELO ; CUNHA, ANTONIO R. ; ARAUJO, RAIANE S. ; Provasi, Patricio F. ; **Canuto, Sylvio** . Assessing the dipolar-octupolar NLO behavior of substituted thiosemicarbazone assemblies. CHEMICAL PHYSICS LETTERS **JCR**, v. 831, p. 140807-140807-9, 2023. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) ¹ | [SCOPUS](#) ¹

7.

FONSECA, SÁVIO ; DOS SANTOS, NEIDY S. S. ; TORRES, ALBERTO ; SIQUEIRA, MARCELO ; DA CUNHA, ANTONIO ; **MANZONI, VINÍCIUS** ; Provasi, Patricio F. ; GESTER, RODRIGO ; **Canuto, Sylvio** . Role of the Solvent and Intramolecular Hydrogen Bonds in the Antioxidative Mechanism of Prenylisoflavone from Leaves of Vatairea guianensis. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A **JCR**, v. 127, p. 10807-10816, 2023.

8.

VALVERDE, DANILLO ; **Georg, Herbert C.** ; **Canuto, Sylvio** . Free-Energy Landscape of the S_N2 Reaction CH₃Br + Cl⁻ → CH₃Cl + Br⁻ in Different Liquid Environments. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B **JCR**, v. 126, p. 3685-3692, 2022. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) ² | [SCOPUS](#) ²

9.

VALVERDE, DANILLO ; MAI, SEBASTIAN ; **Canuto, Sylvio** ; **Borin, Antonio Carlos** ; GONZÁLEZ, LETICIA . Ultrafast Intersystem Crossing Dynamics of 6-Selenoguanine in Water. JACS **JCR**, v. 144, p. 1699-1711, 2022. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) ⁹ | [SCOPUS](#) ¹⁰

10.

HIDALGO CARDENUTO, MARCELO ; CEZAR, HENRIQUE M. ; MIKKELSEN, KURT V. ; P. A. SAUER, STEPHAN ; **COUTINHO, Kaline** ; **Canuto, Sylvio** . A QM/MM study of the conformation stability and electronic structure of the photochromic switches derivatives of DHA/VHF in acetonitrile solution. SPECTROCHIMICA ACTA PART A-MOLECULAR AND BIOMOLECULAR SPECTROSCOPY **JCR**, v. 251, p. 119434, 2021. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) ¹⁰ | [SCOPUS](#) ¹⁰

11.

VALVERDE, DANILLO ; MAI, SEBASTIAN ; SANCHES DE ARAÚJO, ADALBERTO VASCONCELOS ; **Canuto, Sylvio** ; GONZALEZ, LETICIA ; **Borin, Antonio Carlos** . On the population of triplet states of 2-selenothymine. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS **JCR**, v. 23, p. 5447-5454, 2021. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** [™] 7 | **SCOPUS** 8

12.

FANG, YE-GUANG ; VALVERDE, DANILLO ; MAI, SEBASTIAN ; **Canuto, Sylvio** ; **Borin, Antonio Carlos** ; CUI, GANGLONG ; GONZALEZ, LETICIA . Excited-State Properties and Relaxation Pathways of Selenium-Substituted Guanine Nucleobase in Aqueous Solution and DNA Duplex. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B **JCR**, v. 125, p. 1778-1789, 2021. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** [™] 18 | **SCOPUS** 19

13.

NIKOLAEV, DMITRII M. ; MANATHUNGA, MADUSHANKA ; OROZÇO-GONZALEZ, YOELVIS ; SHTYROV, ANDREY A. ; GUERRERO MARTÍNEZ, YANSEL OMAR ; GOZEM, SAMER ; RYAZANTSEV, MIKHAIL N. ; **COUTINHO, Kaline** ; **Canuto, Sylvio** ; OLIVUCCI, MASSIMO . Free Energy Computation for an Isomerizing Chromophore in a Molecular Cavity via the Average Solvent Electrostatic Configuration Model: Applications in Rhodopsin and Rhodopsin-Mimicking Systems. Journal of Chemical Theory and Computation **JCR**, v. 17, p. 5885-5895, 2021. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** [™] 5 | **SCOPUS** 5

14.

ASSIS OLIVEIRA, LEONARDO BRUNO ; **Fonseca, Tertius L.** ; CABRAL, BENEDITO J. C. ; **COUTINHO, Kaline** ; **Canuto, Sylvio** . Preferential solvation and optical properties of eumelanin building blocks in binary mixture of methanol and water. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **JCR**, v. 155, p. 174504, 2021. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** [™] 4 | **SCOPUS** 4

15.

RAMOS, TÁRCIUS N. ; **Silva, Daniel L.** ; Cabral, Benedito J.C. ; **Canuto, Sylvio** . On the spectral line width broadening for simulation of the two-photon absorption cross-section of para-Nitroaniline in liquid environment. JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS **JCR**, v. 301, p. 112405, 2020. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** [™] 7 | **SCOPUS** 7

16.

CEZAR, HENRIQUE M. ; **Canuto, Sylvio** ; **COUTINHO, Kaline** . Understanding the absorption spectrum of mesityl oxide dye in solvents of different polarities. JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS **JCR**, v. 307, p. 112924, 2020. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** [™] 10 | **SCOPUS** 10

17.

Bistafa, Carlos ; RAMOS, TÁRCIUS N. ; COUTINHO, Kaline ; **Canuto, Sylvio** . Quantum mechanics meets scaling theory near the critical point. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS **JCR**, v. 139, p. 80, 2020.

18.

CEZAR, HENRIQUE MUSSELI ; **Canuto, Sylvio** ; COUTINHO, Kaline . DICE: A Monte Carlo code for molecular simulation including Configurational Bias Monte Carlo method. Journal of Chemical Information and Modeling **JCR**, v. 60, p. 3472-3488, 2020. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 38 | **SCOPUS** 42

19.

Ludwig, Valdemir ; DA COSTA LUDWIG, ZÉLIA M. ; VALVERDE, DANILLO ; GEORG, HERBERT ; **Canuto, Sylvio** . Free energy gradient for understanding the stability and properties of neutral and charged L-alanine molecule in water. JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS **JCR**, v. 319, p. 114109, 2020. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 4 | **SCOPUS** 4

20.

GESTER, RODRIGO ; CARRANO, RAMIRO S. GALEANO ; Provasi, Patricio F. ; Bistafa, Carlos ; **Canuto, Sylvio** . Theoretical analysis of the influence of C-H...O bonds on the NMR constants of uracil in DMSO. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS **JCR**, v. 139, p. 155, 2020. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 6 | **SCOPUS** 5

21.

GESTER, RODRIGO ; DAMASCENO, MARCUS V.A. ; **Canuto, Sylvio** ; MANZONI, VINÍCIUS . A theoretical study of the magnetic shielding of ¹⁵N of formamide in liquid water. JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS **JCR**, v. 320, p. 114415, 2020. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 11 | **SCOPUS** 11

22.

SANCHES DE ARAÚJO, ADALBERTO VASCONCELOS ; VALVERDE, DANILLO ; **Canuto, Sylvio** ; Borin, Antonio Carlos . Solvation Structures and Deactivation Pathways of Luminescent Isothiazole-Derived Nucleobases: tz A , tz G , and tz I. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A **JCR**, v. 124, p. 6834-6844, 2020. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 8 | **SCOPUS** 8

23.

RAMOS, TÁRCIUS N. ; **Canuto, Sylvio** ; CHAMPAGNE, BENOÎT . Unraveling the Electric Field-Induced Second Harmonic Generation Responses of Stilbazolium Ion Pairs Complexes in Solution Using a Multiscale Simulation Method. JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND MODELING (ONLINE) **JCR**, v. 60, p. 4817-4826, 2020. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 13 | **SCOPUS** 13

24.

VEQUI-SUPLICY, CÍNTIA C. ; OROZCO-GONZALEZ, YOELVIS ; LAMY, M. TERESA ; **Canuto, Sylvio** ; **COUTINHO, Kaline** . A new interpretation of the absorption and the dual fluorescence of Prodan in solution. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **JCR**, v. 153, p. 244104, 2020. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** ¹¹ | **SCOPUS** ¹²

25.

VALVERDE, DANILLO ; SANCHES DE ARAUJO, ADALBERTO VASCONCELOS ; **Canuto, Sylvio** ; **Borin, Antonio Carlos** . Photophysics of Emissive tzC and tzU Pyrimidine Analogues. ChemPhotoChem **JCR**, v. 3, p. 916-924, 2019. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** ³ | **SCOPUS** ³

26.

COLHERINHAS, G. ; OLIVEIRA, L.B.A. ; CASTRO, M.A. ; FONSECA, T.L. ; **COUTINHO, K.** ; **Canuto, S.** . On the calculation of magnetic properties of nucleic acids in liquid water with the sequential QM/MM method. JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS **JCR**, v. 294, p. 111611, 2019. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** ¹² | **SCOPUS** ¹³

27.

LACERDA, EVANILDO G. ; SAUER, STEPHAN P. A. ; MIKKELSEN, KURT V. ; **COUTINHO, Kaline** ; **Canuto, Sylvio** . Theoretical study of the NMR chemical shift of Xe in supercritical condition. JOURNAL OF MOLECULAR MODELING **JCR**, v. 24, p. 62, 2018. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** ² | **SCOPUS** ²

28.

Chaudhuri, Puspitapallab ; **Canuto, Sylvio** ; Provasi, Patricio F. . NMR spin-spin coupling constants in hydrogen-bonded glycine clusters. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY **JCR**, v. 118, p. e25608, 2018. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** ² | **SCOPUS** ⁴

29.

ABEGÃO, LUIS M.G. ; FONSECA, RUBEN D. ; RAMOS, TÁRCIUS N. ; MAHUTEAU-BETZER, FLORENCE ; PIGUEL, SANDRINE ; JOATAN R., JOSÉ ; MENDONÇA, CLEBER R. ; **Canuto, Sylvio** ; **Silva, Daniel L.** ; DE BONI, Leonardo . Oxazole Dyes with Potential for Photoluminescence Bioprobes: A Two-Photon Absorption Study. Journal of Physical Chemistry C **JCR**, v. 122, p. 10526, 2018. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** ¹³ | **SCOPUS** ¹⁴

30.

CEZAR, HENRIQUE M. ; **Canuto, Sylvio** ; **COUTINHO, Kaline** . Solvent effect on the syn/anti conformational stability: A comparison between conformational bias Monte Carlo and molecular dynamics methods. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY **JCR**, v. 119, p. e25688, 2018. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** ²⁰ | **SCOPUS** ²¹

31.

Bistafa, Carlos ; KITAMURA, YUKICHI ; NAGAOKA, MASATAKA ; **Canuto, Sylvio** . Microscopic Origin of Different Hydration Patterns of para -Nitrophenol and Its Anion: A Study Combining Multiconfigurational Calculations and the Free-Energy Gradient Method. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B **JCR**, v. 122, p. 9202-9209, 2018. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 5 | [SCOPUS](#) 5

32.

RAMOS, TÁRCIUS N. ; **Canuto, Sylvio** . A theoretical study of the low-lying excited states and the photophysics of dimethoxy curcumin in cyclohexane and acetonitrile. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS **JCR**, v. 136, p. 78, 2017.

33.

VALVERDE, DANILLO ; VASCONCELOS SANCHES DE ARAUJO, ADALBERTO ; CARLOS BORIN, ANTONIO ; **Canuto, Sylvio** . Electronic structure and absorption spectra of fluorescent nucleoside analogues. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS **JCR**, v. 19, p. 29354-29363, 2017. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 13 | [SCOPUS](#) 13

34.

OROZCO-GONZALEZ, YOELVIS ; MANATHUNGA, MADUSHANKA ; MARÍN, MARÍA DEL CARMEN ; AGATHANGELOU, DAMIANOS ; JUNG, KWANG-HWAN ; MELACCIO, FEDERICO ; FERRE, NICOLAS ; HAACKE, STEFAN ; **COUTINHO, Kaline** ; **Canuto, Sylvio** ; OLIVUCCI, MASSIMO . An Average Solvent Electrostatic Configuration Protocol for QM/MM Free Energy Optimization: Implementation and Application to Rhodopsin Systems. Journal of Chemical Theory and Computation **JCR**, v. 13, p. 6391-6404, 2017. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 25 | [SCOPUS](#) 27

35.

MANZONI, VINICIUS ; **COUTINHO, Kaline** ; **Canuto, Sylvio** . An insightful approach for understanding solvatochromic reversal. Chemical Physics Letters (Print) **JCR**, v. 655-656, p. 30, 2016. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 16 | [SCOPUS](#) 17

36.

Modesto-Costa, Lucas ; MUKHERJEE, PRASANTA KUMAR ; **Canuto, Sylvio** . A CASPT2 study of the spectral shift of the resonance emission lines of Rb and Cs embedded in liquid He. Chemical Physics Letters (Print) **JCR**, v. 655-656, p. 91-95, 2016.

37.

Cabral, Benedito J. Costa ; **Coutinho, Kaline** ; **Canuto, Sylvio** . A First-Principles Approach to the Dynamics and Electronic Properties of -Nitroaniline in Water. The Journal of Physical Chemistry. A **JCR**, v. 120, p. 3878-3887, 2016. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 23 | [SCOPUS](#) 22

38.

OROZCO-GONZALEZ, YOELVIS ; TARAKESHWAR, PILARISSETTY ; **Canuto, Sylvio** ; MUJICA, VLADIMIRO . Solvent Effects on the Dynamic Polarizability and Raman Response of Molecule-Metal Oxide Hybrid Clusters. ChemPhysChem (Print) **JCR**, v. 17, p. 2590-2595, 2016. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 5 | **SCOPUS** 4

39.

ASSIS OLIVEIRA, LEONARDO BRUNO ; L. FONSECA, TERTIUS ; Costa Cabral, Benedito J. ; **COUTINHO, Kaline** ; **Canuto, Sylvio** . Hydration effects on the electronic properties of eumelanin building blocks. The Journal of Chemical Physics **JCR**, v. 145, p. 084501, 2016. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 15 | **SCOPUS** 14

40.

CORNETTA, LUCAS M. ; **Coutinho, Kaline** ; **Canuto, Sylvio** ; VARELLA, MARCIO T. DO N. . Free energy barrier for dissociation of the guanosine monophosphate anion in water. The European Physical Journal. D, Atomic, Molecular and Optical Physics (Print) **JCR**, v. 70, p. 176 (1)-176 (7), 2016. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 11 | **SCOPUS** 11

41.

Bistafa, Carlos ; **Modesto-Costa, Lucas** ; **Canuto, Sylvio** . A complete basis set study of the lowest $n\text{-}\pi^*$ and $\pi\text{-}\pi^*$ electronic transitions of acrolein in explicit water environment. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS **JCR**, v. 135, p. 129, 2016. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 13 | **SCOPUS** 15

42.

Silva, Daniel L. ; FONSECA, RUBEN D. ; **Vivas, Marcelo G.** ; ISHOW, E. ; **Canuto, Sylvio** ; Mendonca, Cleber R. ; DE BONI, Leonardo . Experimental and theoretical investigation of the first-order hyperpolarizability of a class of triarylamine derivatives. The Journal of Chemical Physics **JCR**, v. 142, p. 064312, 2015. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 22 | **SCOPUS** 25

43.

Modesto-Costa, Lucas ; **Canuto, Sylvio** ; Mukherjee, Prasanta K. . Magnetic dipolar and quadrupolar transitions in two-electron atoms under exponential-cosine-screened Coulomb potential. Physics of Plasmas **JCR**, v. 22, p. 032902, 2015. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 6 | **SCOPUS** 6

44.

Cabral, Benedito J. Costa ; **RIVELINO, ROBERTO** ; **COUTINHO, Kaline** ; **Canuto, Sylvio** . A first principles approach to the electronic properties of liquid and supercritical CO₂. The Journal of Chemical Physics **JCR**, v. 142, p. 024504, 2015. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 13 | **SCOPUS** 16

45.

HIDALGO, MARCELO ; **COUTINHO, Kaline** ; **Canuto, Sylvio** . Behavior of the dielectric constant of Ar near the critical point. Physical

46.

[VIVAS, MARCELO G](#) ; Silva, Daniel Luiz ; RODRIGUEZ, RUBEN D. F. ; **Canuto, Sylvio** ; MALINGE, JEREMY ; ISHOW, ELENA ; Mendonca, Cleber R. ; DE BONI, Leonardo . Interpreting the First-Order Electronic Hyperpolarizability for a Series of Octupolar Push-Pull Triarylamine Molecules Containing Trifluoromethyl. Journal of Physical Chemistry. C **JCR**, v. 119, p. 150511135134006-12597, 2015. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 15 | [SCOPUS](#) 16

47.

[Modesto-Costa, Lucas](#) ; Mukherjee, Prasanta K. ; **Canuto, Sylvio** . Theoretical Study of the Spectral Shift of the Absorption Line of Rb and Cs in Liquid Helium. Chemical Physics Letters (Print) **JCR**, v. 633, p. 256-260, 2015. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 4 | [SCOPUS](#) 4

48.

Cabral, Benedito J. Costa ; [RIVELINO, ROBERTO](#) ; [COUTINHO, Kaline](#) ; **Canuto, Sylvio** . Probing Lewis Acid-Base Interactions with Born-Oppenheimer Molecular Dynamics: The Electronic Absorption Spectrum of p -Nitroaniline in Supercritical CO 2. Journal of Physical Chemistry. B **JCR**, v. 119, p. 8397-8405, 2015. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 7 | [SCOPUS](#) 7

49.

[Modesto-Costa, Lucas](#) ; **Canuto, Sylvio** ; Mukherjee, Prasanta K. ; FRICKE, BURKHARD . A simple model for a theoretical study of the spectral line shifts of alkali atoms attached to helium nanodroplets. Chemical Physics Letters (Print) **JCR**, v. 644, p. 142-146, 2015. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 4 | [SCOPUS](#) 4

50.

[Vivas, Marcelo G.](#) ; [Silva, Daniel L.](#) ; MALINGE, JÉRÉMY ; BOUJTITA, MOHAMMED ; ZALE'NY, ROBERT ; Bartkowiak, Wojciech ; Ågren, Hans ; **Canuto, Sylvio** ; DE BONI, Leonardo ; ISHOW, ELENA ; Mendonca, Cleber R. . Molecular Structure - Optical Property Relationships for a Series of Non-Centrosymmetric Two-photon Absorbing Push-Pull Triarylamine Molecules. Scientific Reports **JCR**, v. 4, p. 4447, 2014. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 55 | [SCOPUS](#) 51

51.

HIDALGO, MARCELO ; [RIVELINO, ROBERTO](#) ; **Canuto, Sylvio** . Origin of the Red Shift for the Lowest Singlet $n \rightarrow n^*$ Charge-Transfer Absorption of p -Nitroaniline in Supercritical CO 2. Journal of Chemical Theory and Computation **JCR**, v. 10, p. 1554-1562, 2014. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 22 | [SCOPUS](#) 22

52.

Cabral, Benedito J.C. ; CRUZEIRO, VINÍCIUS WILIAN D. ; COUTINHO, Kaline ; Canuto, Sylvio . Free base phthalocyanine: Influence of thermal effects and dimerization on the electronic absorption spectrum. Chemical Physics Letters (Print) *JCR*, v. 595-596, p. 97-102, 2014. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 7 | [SCOPUS](#) 8

53.

Silva, Daniel L. ; Murugan, N. Arul ; Kongsted, Jacob ; Ågren, Hans ; Canuto, Sylvio . Self-Aggregation and Optical Absorption of Stilbazolium Merocyanine in Chloroform. Journal of Physical Chemistry. B *JCR*, v. 118, p. 140206131911006, 2014. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 20 | [SCOPUS](#) 19

54.

Gester, Rodrigo M. ; Bistafa, Carlos ; Georg, Herbert C. ; COUTINHO, Kaline ; Canuto, Sylvio . Theoretically describing the 170 magnetic shielding constant of biomolecular systems: uracil and 5-fluorouracil in water environment. Theoretical Chemistry Accounts (Print) *JCR*, v. 133, p. 1424(1)-1424(8), 2014. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 19 | [SCOPUS](#) 15

55.

Bistafa, Carlos ; Georg, Herbert C. ; Canuto, Sylvio . Combining ab initio multiconfigurational and Free Energy Gradient methods to study the $n\text{-}\pi^*$ excited state structure and properties of uracil in water. Computational and Theoretical Chemistry *JCR*, v. 1040-1041, p. 312-320, 2014. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 27 | [SCOPUS](#) 26

56.

Cabral, Benedito J.C. ; COUTINHO, Kaline ; Canuto, Sylvio . Dynamics of endo- vs. exo-complexation and electronic absorption of calix[4]arene-Ar₂. Chemical Physics Letters (Print) *JCR*, v. 612, p. 266-272, 2014. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 5 | [SCOPUS](#) 5

57.

CAPUTO, MARIA CRISTINA ; PROVASI, PATRICIO FEDERICO ; BENÍTEZ, LUCIA ; Georg, Herbert C. ; Canuto, Sylvio ; COUTINHO, Kaline . A Monte Carlo-Quantum Mechanics Study of Magnetic Properties of Hydrogen Peroxide in Liquid Water. The Journal of Physical Chemistry. A *JCR*, v. 118, p. 140721163457009-6247, 2014. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 16 | [SCOPUS](#) 17

58.

DE OLIVEIRA, ELIANE M. ; FREITAS, THIAGO C. ; COUTINHO, Kaline ; DO N. VARELJA, MÁRCIO T. ; Canuto, Sylvio ; LIMA, Marco A. P. ; BETTEGA, MÁRCIO H. F. . Communication: Transient anion states of phenol-(H₂O)_n (n = 1, 2) complexes: Search for microsolvation signatures. The Journal of Chemical Physics *JCR*, v. 141, p. 051105, 2014. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 13 | [SCOPUS](#) 14

59.

Orestes, Ednilsom ; Bistafa, Carlos ; RIVELINO, ROBERTO ; **Canuto, Sylvio** . Including Thermal Disorder of Hydrogen Bonding to Describe the VCD Spectrum of Zwitterionic L-alanine in Water. The Journal of Physical Chemistry. A *JCR*, v. 119, p. 141126005413003-5106, 2014. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 6 | [SCOPUS](#) 6

60.

HALDAR, S. K. ; CHAKRABARTI, B. ; CHAVDA, N. D. ; DAS, T. K. ; **Canuto, S.** ; KOTA, V. K. B. . Level-spacing statistics and spectral correlations in diffuse van der Waals clusters. PHYSICAL REVIEW A *JCR*, v. 89, p. 043607, 2014. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 9 | [SCOPUS](#) 9

61.

BISTAFA, CARLOS ; **Canuto, Sylvio** . Solvent effects on the two lowest-lying singlet excited states of 5-fluorouracil. Theoretical Chemistry Accounts (Print) *JCR*, v. 132, p. 1299, 2013. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 22 | [SCOPUS](#) 26

62.

HIDALGO, MARCELO ; **Canuto, Sylvio** . A theoretical study of the spectral shifts of Xe atom in Ar environment. Physics Letters. A (Print) *JCR*, v. 377, p. 1720-1724, 2013. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 4 | [SCOPUS](#) 4

63.

VIVAS, MARCELO G ; **SILVA, DANIEL LUIZ** ; **DE BONI, LEONARDO** ; BRETONNIERE, YANN ; ANDRAUD, CHANTAL ; LAIBE-DARBOUR, FLORENCE ; MULATIER, JEAN-CHRISTOPHE ; ZALESNY, ROBERT ; BARTKOWIAK, WOJCIECH ; **Canuto, Sylvio** ; **MENDONCA, CLEBER RENATO** . Revealing the Electronic and Molecular Structure of Randomly Oriented Molecules by Polarized Two-Photon Spectroscopy. Journal of Physical Chemistry Letters *JCR*, v. 4, p. 130501132140001, 2013. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 16 | [SCOPUS](#) 17

64.

FERREIRA, P H D ; **SILVA, D L** ; **SIQUEIRA, J P** ; **BALOGH, D T** ; **CANUTO, S** ; **MISOGUTI, L** ; **MENDONCA, C R** . Enhancement of laser induced Au nanoparticle formation by femtosecond pulse shaping. Laser Physics *JCR*, v. 23, p. 076004, 2013. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 2 | [SCOPUS](#) 2

65.

Freitas, T. C. ; **COUTINHO, K.** ; **VARELLA, M. T. DO N.** ; Lima, M. A. P. ; **CANUTO, S.** ; **Bettega, M. H. F.** . Electron collisions with the HCOOH-(H₂O)_n complexes (n = 1, 2) in liquid phase: The influence of microsolvation on the π* resonance of formic acid. The Journal of Chemical Physics *JCR*, v. 138, p. 174307, 2013. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 23 | [SCOPUS](#) 22

66.

CABRAL, BENEDITO J. C. ; **Coutinho, Kaline** ; **Canuto, Sylvio** . Born-Oppenheimer molecular dynamics and electronic properties of

67.

[OROZCO-GONZALEZ, YOELVIS](#) ; [Bistafa, Carlos](#) ; [Carlos Bistafa](#) ; **CANUTO, S.** . Solvent Effect on the Stokes Shift and on the Nonfluorescent Decay of the Daidzein Molecular System. The Journal of Physical Chemistry A **JCR**, v. 117, p. 4404-4411, 2013. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 11 | [SCOPUS](#) 11

68.

[COLHERINHAS, G.](#) ; [FONSECA, T. L.](#) ; [CASTRO, M. A.](#) ; [COUTINHO, K.](#) ; **CANUTO, S.** . Isotropic magnetic shielding constants of retinal derivatives in aprotic and protic solvents. The Journal of Chemical Physics **JCR**, v. 139, p. 094502, 2013. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 22 | [SCOPUS](#) 21

69.

[Silva, D.L.](#) ; [BARRETO, R.C.](#) ; [LACERDA, E.G.](#) ; [COUTINHO, K.](#) ; **CANUTO, S.** . One- and two-photon absorption of fluorescein dianion in water: A study using S-QM/MM methodology and ZINDO method. Spectrochimica Acta. Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy (Print) **JCR**, v. 119, p. 63-75, 2013. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 8 | [SCOPUS](#) 8

70.

[Orestes, Ednilsom](#) ; [Chaudhuri, Puspitapallab](#) ; [Canuto, Sylvio](#) . Effect of hydrogen bond formation on the elastic molecular scattering: a case study with methanol. Molecular Physics (Print) **JCR**, v. 110, p. 297-306, 2012. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 10 | [SCOPUS](#) 10

71.

[Modesto-Costa, Lucas](#) ; **CANUTO, S.** ; [Coutinho, Kaline](#) ; [COUTINHO, K.](#) ; [Mukherjee, Prasanta K.](#) . Calculations of the spectral shifts and line profiles of alkaline earth atoms in liquid helium environment. Chemical Physics Letters (Print) **JCR**, v. 533, p. 25-29, 2012. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 8 | [SCOPUS](#) 8

72.

[Jaramillo, Paula](#) ; [Coutinho, Kaline](#) ; [Cabras, Benedito J. Costa](#) ; **CANUTO, S.** . Ionization of chlorophyll-c2 in liquid methanol. Chemical Physics Letters (Print) **JCR**, v. 546, p. 67-73, 2012. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 6 | [SCOPUS](#) 8

73.

Silva, Daniel L. ; Kongsted, Jacob ; Ågren, Hans ; **Canuto, Sylvio** ; Rinkevicius, Zilvinas ; Murugan, N. Arul . The Role of Molecular Conformation and Polarizable Embedding for One- and Two-Photon Absorption of Disperse Orange 3 in Solution. Journal of Physical Chemistry. B **JCR**, v. 116, p. 8169-8181, 2012. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 38 | SCOPUS 40

74.

DEBNATH, PANKAJ KUMAR ; Chakrabarti, Barnali ; Das, Tapan Kumar ; **Canuto, Sylvio** . Structural properties and energetics of diffuse 87Rb clusters in three-dimension. The Journal of Chemical Physics **JCR**, v. 137, p. 014301, 2012. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 6 | SCOPUS 5

75.

UENO, LEONARDO T. ; ROBERTO-NETO, ORLANDO ; Malaspina, Thaciana ; LOPES, CINARA ; **Canuto, Sylvio** ; MACHADO, FRANCISCO B.C. . Theoretical study of the XP3 (X=Al, B, Ga) clusters. Chemical Physics (Print) **JCR**, v. 399, p. 23-27, 2012. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 2 | SCOPUS 2

76.

Gester, Rodrigo M. ; Georg, Herbert C. ; **Canuto, Sylvio** ; Provasi, Patricio F. ; **Fonseca, Tertius L.** . A simple analysis of the influence of the solvent-induced electronic polarization on the 15N magnetic shielding of pyridine in water. Theoretical Chemistry Accounts (Print) **JCR**, v. 131, p. 1220, 2012. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 19 | SCOPUS 18

77.

Georg, Herbert C. ; **Canuto, Sylvio** . Electronic Properties of Water in Liquid Environment. A Sequential QM/MM Study Using the Free Energy Gradient Method. The Journal of Physical Chemistry. B (1997 : Online) **JCR**, v. 116, p. 11247-11254, 2012. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 42 | SCOPUS 43

78.

DUARTE, HÉLIO ; **Canuto, Sylvio** . Proceedings of the 16th Brazilian symposium of theoretical chemistry. International Journal of Quantum Chemistry **JCR**, v. 112, p. 3131-3131, 2012.

79.

OROZCO-GONZALEZ, YOELVIS ; Coutinho, Kaline ; PEON, JORGE ; **Canuto, Sylvio** . Theoretical study of the absorption and nonradiative deactivation of 1-nitronaphthalene in the low-lying singlet and triplet excited states including methanol and ethanol solvent effects. The Journal of Chemical Physics **JCR**, v. 137, p. 054307, 2012. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 33 | SCOPUS 33

80.

VIVAS, MARCELO G ; SILVA, DANIEL LUIZ ; DE BONI, LEONARDO ; BRETONNIERE, YANN ; ANDRAUD, CHANTAL ; LAIBE-DARBOUR, FLORENCE ; MULATIER, JEAN-CHRISTOPHE ; ZALESNY, ROBERT ; BARTKOWIAK, WOJCIECH ; **Canuto, Sylvio** ; MENDONCA, CLEBER RENATO . Experimental and Theoretical Study on the One- and Two-photon Absorption Properties of Novel Organic Molecules based on Phenylacetylene and Azoaromatic Moieties. Journal of Physical Chemistry. B **JCR**, v. 1, p. 121121163356004-1, 2012. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 25 | SCOPUS 24

81.

D.L. Silva ; L De Boni ; D.S.Correa ; COSTA, S C S ; A A Hidalgo ; S C Zilio ; C R Mendonça ; **CANUTO, S** . Two-photon absorption in oxazole derivative: an experimental and theoretical study. Journal of Nonlinear Optical Physics and Materials **JCR**, v. 34, p. 1013, 2012.

82.

De Boni, L. ; Correa, D. S. ; Silva, D. L. ; Gonc?alves, P. J. ; Zilio, S. C. ; Parra, G. G. ; Borissevitch, I. E. ; **CANUTO, S.** ; Mendonca, C. R. . Experimental and theoretical study of two-photon absorption in nitrofurán derivatives: Promising compounds for photochemotherapy. The Journal of Chemical Physics **JCR**, v. 134, p. 014509, 2011. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 22 | SCOPUS 21

83.

Garrido, Juan D. ; Ballester, Maikel Y. ; Orozco-Gonza?lez, Yoelvis ; **Canuto, Sylvio** . CASPT2 Study of the Potential Energy Surface of the HSO System. The Journal of Physical Chemistry. A **JCR**, v. 115, p. 1453-1461, 2011. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 28 | SCOPUS 29

84.

Mateus, Margarida P.S. ; Galamba, Nuno ; Cabral, Benedito J. Costa ; Coutinho, Kaline ; **Canuto, Sylvio** . Electronic properties of a methane?water solution. Chemical Physics Letters (Print) **JCR**, v. 506, p. 183-189, 2011. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 12 | SCOPUS 12

85.

Das, Tapan Kumar ; Chakrabarti, Barnali ; **Canuto, Sylvio** . Use of correlated potential harmonic basis functions for the description of the 4He trimer and small clusters. The Journal of Chemical Physics **JCR**, v. 134, p. 164106, 2011. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 11 | SCOPUS 12

86.

Modesto-Costa, Lucas ; Coutinho, Kaline ; Mukherjee, Prasanta ; **Canuto, Sylvio** . Combining Monte Carlo simulation and density-functional theory to describe the spectral changes of Na_{2} in liquid helium. Physical Review. A **JCR**, v. 83, p. 042515, 2011. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 6 | SCOPUS 6

87.

Manzoni, Vinićcius ; [Lyra, Marcelo L.](#) ; [Coutinho, Kaline](#) ; **Canuto, Sylvio** . Comparison of polarizable continuum model and quantum mechanics/molecular mechanics solute electronic polarization: Study of the optical and magnetic properties of diazines in water. The Journal of Chemical Physics **JCR**, v. 135, p. 144103, 2011. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 26 | [SCOPUS](#) 26

88.

[Jaramillo, Paula](#) ; [Coutinho, Kaline](#) ; Cabral, Benedito J.C. ; **Canuto, Sylvio** . Explicit solvent effects on the visible absorption spectrum of a photosynthetic pigment: Chlorophyll-c2 in methanol. Chemical Physics Letters (Print) **JCR**, v. 516, p. 250-253, 2011. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 20 | [SCOPUS](#) 22

89.

Oliveira, Leonardo B.A. ; [Fonseca, Tertius L.](#) ; [Coutinho, Kaline](#) ; **Canuto, Sylvio** . A sequential MC/TD-DFT study of the solvatochromic shift of the pyridinium-N-phenoxide betaine dye in water using standard and long-range corrected functionals. Chemical Physics Letters (Print) **JCR**, v. 514, p. 251-256, 2011. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 14 | [SCOPUS](#) 14

90.

[Dutra, Adriano S.](#) ; [Castro, Marcos A.](#) ; [Fonseca, Tertius L.](#) ; [Fileti, Eudes E.](#) ; **Canuto, Sylvio** . Hyperpolarizabilities of the methanol molecule: A CCSD calculation including vibrational corrections. The Journal of Chemical Physics **JCR**, v. 132, p. 034307, 2010. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 26 | [SCOPUS](#) 25

91.

[Chaudhuri, Puspitapallab](#) ; **Canuto, Sylvio** . Many-body energy decomposition of hydrogen-bonded glycine clusters in gas-phase. Chemical Physics Letters (Print) **JCR**, v. 491, p. 86-90, 2010. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 9 | [SCOPUS](#) 9

92.

Kongsted, Jacob ; Mennucci, Benedetta ; [Coutinho, Kaline](#) ; **Canuto, Sylvio** . Solvent effects on the electronic absorption spectrum of camphor using continuum, discrete or explicit approaches. Chemical Physics Letters (Print) **JCR**, v. 484, p. 185-191, 2010. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 23 | [SCOPUS](#) 21

93.

Pasalic, Hasan ; Aquino, Adélia J. A. ; Tunega, Daniel ; Haberhauer, Georg ; Gerzabek, Martin H. ; [Georg, Herbert C.](#) ; [Moraes, Tatiane F.](#) ; [Coutinho, Kaline](#) ; **Canuto, Sylvio** ; Lischka, Hans . Thermodynamic stability of hydrogen-bonded systems in polar and nonpolar environments. Journal of Computational Chemistry **JCR**, p. NA-NA, 2010. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 30 | [SCOPUS](#) 14

94.

Jaramillo, Paula ; Coutinho, Kaline ; **Canuto, Sylvio** . Continuum, discrete, and explicit solvation models for describing the low-lying absorption spectrum of the pterin acid in aqueous environment. International Journal of Quantum Chemistry **JCR**, p. n/a-n/a, 2010. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 5 | **SCOPUS** 5

95.

Fonseca, Tertius L. ; Coutinho, Kaline ; **Canuto, Sylvio** . Hydrogen bond interactions between acetone and supercritical water. PCCP. Physical Chemistry Chemical Physics **JCR**, p. x, 2010. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 16 | **SCOPUS** 17

96.

CANUTO, S.; **COUTINHO, K.** ; **CABRAL, B J Costa** ; Zakrzewski V.G. ; Ortiz V. . Delocalized water and fluoride contributions to Dyson orbitals for electron detachment from the hydrated fluoride anion. The Journal of Chemical Physics **JCR**, v. 132, p. 214507, 2010. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 13 | **SCOPUS** 13

97.

LUDWIG, V ; **COSTA, M. F.** ; **AMARAL, M. S.** ; **BORIN, A C** ; **CANUTO, S.** ; **SERRANOANDRES, L** . Photophysics and photostability of adenine in aqueous solution: A theoretical study. Chemical Physics Letters (Print) **JCR**, v. 492, p. 164-169, 2010. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 28 | **SCOPUS** 30

98.

Costa Cabral, Benedito J. ; Coutinho, Kaline ; **Canuto, Sylvio** . Electronic properties of liquid hydrogen fluoride: A sequential quantum mechanical/Born-Oppenheimer molecular dynamics approach. Chemical Physics Letters (Print) **JCR**, v. 495, p. 40-45, 2010. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 6 | **SCOPUS** 6

99.

Barreto, Rafael C. ; **Canuto, Sylvio** . Characterization and spectroscopic analysis of phenol-ethanol hydrogen bonded clusters. Chemical Physics Letters (Print) **JCR**, v. 496, p. 236-242, 2010. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 1 | **SCOPUS** 1

100

.

Silva, Daniel ; Coutinho, Kaline ; **Canuto, Sylvio** . Electronic spectroscopy of biomolecules in solution: fluorescein dianion in water. Molecular Physics (Print) **JCR**, p. 1-6, 2010. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 7 | **SCOPUS** 7

101

.

OROZCO-GONZÁLEZ, YOELVIS ; COUTINHO, Kaline ; **Canuto, Sylvio** . Excited state electronic polarization and reappraisal of the n- π^* emission of acetone in water. Chemical Physics Letters (Print) **JCR**, v. 499, p. 108-112, 2010. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 7 | [SCOPUS](#) 7

102

MANZONI, VINÍCIUS ; Lyra, Marcelo L. ; Gester, Rodrigo M. ; COUTINHO, Kaline ; **Canuto, Sylvio** . Study of the optical and magnetic properties of pyrimidine in water combining PCM and QM/MM methodologies. PCCP. Physical Chemistry Chemical Physics (Print) **JCR**, v. 12, p. 14023-14033, 2010. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 47 | [SCOPUS](#) 47

103

DAS, T ; KUNDU, A ; **CANUTO, S** ; CHAKRABARTI, B . 85Rb Bose-Einstein condensate with tunable interaction: A quantum many body approach. Physics Letters A **JCR**, v. 373, p. 258-261, 2009. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 36 | [SCOPUS](#) 38

104

Barreto, Rafael C. ; Coutinho, Kaline ; Georg, Herbert C. ; **Canuto, Sylvio** . Combined Monte Carlo and quantum mechanics study of the solvatochromism of phenol in water. The origin of the blue shift of the lowest $\pi^*\pi$ transition. PCCP. Physical Chemistry Chemical Physics **JCR**, v. 11, p. 1388, 2009. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 45 | [SCOPUS](#) 44

105

Mata, Ricardo A. ; Cabral, Benedito J. Costa ; Millot, Claude ; Coutinho, Kaline ; **Canuto, Sylvio** . Dynamic polarizability, Cauchy moments, and the optical absorption spectrum of liquid water: A sequential molecular dynamics/quantum mechanical approach. Journal of Chemical Physics, v. 130, p. 014505, 2009. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 27 | [SCOPUS](#) 25

106

FONSECA, T. L. ; Georg, H. C. ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Polarization and Spectral Shift of Benzophenone in Supercritical Water. Journal of Physical Chemistry. A, Molecules, Spectroscopy, Kinetics, Environment, & General Theory **JCR**, v. 113, p. 5112-5118, 2009. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 22 | [SCOPUS](#) 22

107

Jaramillo, Paula ; Perez, Patricia ; Fuentealba, Patricio ; **CANUTO, S.** ; Coutinho, Kaline . Solvent Effects on Global Reactivity Properties for Neutral and Charged Systems Using the Sequential Monte Carlo Quantum Mechanics Model. Journal of Physical Chemistry. B **JCR**, v. 113, p. 4314-4322, 2009. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 24 | [SCOPUS](#) 23

108

A.N.Sil ; **CANUTO, S.** ; MUKHERJEE, P.k. . Spectroscopy of Confined Atomic Systems: Effect of Plasma. Advances in Quantum Chemistry **JCR**, v. 58, p. 115, 2009.

109

Gester, Rodrigo M. ; **Georg, Herbert C.** ; **Canuto, Sylvio** ; Caputo, M. Cristina ; Provasi, Patricio F. . NMR Chemical Shielding and Spin? Spin Coupling Constants of Liquid NH₃ : A Systematic Investigation using the Sequential QM/MM Method. The Journal of Physical Chemistry. A **JCR**, v. 113, p. 14936-14942, 2009. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 30 | **SCOPUS** 30

110

Freitas, T. C. ; Lima, M. A. P. ; **CANUTO, S.** ; **Bettega, M. H. F.** . Electron collisions with the CH₂O-H₂O complex. Physical Review. A **JCR**, v. 80, p. 062710, 2009. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 22 | **SCOPUS** 23

111

Fonseca, Tertius L. ; **Castro, Marcos A.** ; Cabral, Benedito J.C. ; **Coutinho, Kaline** ; **Canuto, Sylvio** . Dipole polarizability and Rayleigh light scattering by the hydrated electron. Chemical Physics Letters (Print), v. 481, p. 73-77, 2009. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 11 | **SCOPUS** 11

112

Jaramillo, Paula ; **Coutinho, Kaline** ; **Canuto, Sylvio** . Solvent Effects in Chemical Processes. Water-Assisted Proton Transfer Reaction of Pterin in Aqueous Environment. The Journal of Physical Chemistry. A **JCR**, v. 113, p. 12485-12495, 2009. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 62 | **SCOPUS** 56

113

FREITAS, T C ; BETTEGA, M H F ; LIMA, M A P ; **CANUTO, S.** . Electron collisions with the CH₂O-H₂O complex. JOURNAL OF PHYSICS. CONFERENCE SERIES (ONLINE), v. 194, p. 052009, 2009.

114

Almeida, Ta[^]nia S. ; **Coutinho, Kaline** ; Costa Cabral, Benedito J. ; **Canuto, Sylvio** . Electronic properties of liquid ammonia: A sequential molecular dynamics/quantum mechanics approach. Journal of Chemical Physics, v. 128, p. 014506, 2008. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 32 | **SCOPUS** 33

115

.

Fileti, Eudes E. ; Castro, Marcos A. ; **Canuto, Sylvio** . Calculations of vibrational frequencies, Raman activities and degrees of depolarization for complexes involving water, methanol and ethanol. Chemical Physics Letters, v. 452, p. 54-58, 2008. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#)™ 33 | [SCOPUS](#) 36

116

.

Chaudhuri, Puspitapallab ; **Canuto, Sylvio** . Conformational behavior of different possible ways of oligoglycine formation in a solvent-free environment. Journal of Molecular Structure. Theochem **JCR**, v. 849, p. 25-32, 2008. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#)™ 4 | [SCOPUS](#) 4

117

.

MALASPINA, T ; COUTINHO, K. R. ; **CANUTO, S.** . Analyzing the n->p* electronic transition of formaldehyde in water. A Sequential Monte Carlo/Time-Dependent Density Functional Theory. Journal of the Brazilian Chemical Society (Impresso) **JCR**, v. 19, p. 305, 2008. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#)™ 6 | [SCOPUS](#) 6

118

.

Fonseca, Tertius L. ; Coutinho, Kaline ; **Canuto, Sylvio** . Polarization and solvatochromic shift of ortho-betaine in water. Chemical Physics **JCR**, v. 349, p. 109-114, 2008. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#)™ 25 | [SCOPUS](#) 27

119

.

Fonseca, Tertius L. ; Coutinho, Kaline ; **Canuto, Sylvio** . The isotropic nuclear magnetic shielding constants of acetone in supercritical water: A sequential Monte Carlo/quantum mechanics study including solute polarization. Journal of Chemical Physics, v. 129, p. 034502, 2008. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#)™ 29 | [SCOPUS](#) 28

120

.

Ludwig, Valdemir ; Amaral, Marcos Serrou do ; da Costa, Zélia M. ; Borin, Antonio Carlos ; **Canuto, Sylvio** ; Serrano-Andrés, Luis . 2-Aminopurine non-radiative decay and emission in aqueous solution: A theoretical study. Chemical Physics Letters, v. 463, p. 201-205, 2008. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#)™ 22 | [SCOPUS](#) 23

121

FILETI, E. E. ; GEORG, H C ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Isotropic and Anisotropic Chemical Shifts in Liquid Water: A Sequential QM/MM Study. Journal of the Brazilian Chemical Society **JCR**, v. 18, p. 74, 2007. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 25 | **SCOPUS** 26

122

COUTINHO, K. ; GEORG, H C ; FONSECA, T. L. ; LUDWIG, V ; **CANUTO, S.** . An Efficient Statistically Converged Average Configuration for Solvent Effects. Chemical Physics Letters, v. 437, p. 148, 2007. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 151 | **SCOPUS** 162

123

Das, Tapan Kumar ; **Canuto, Sylvio** ; Kundu, Anasuya ; Chakrabarti, Barnali . Behavior of a Bose-Einstein condensate containing a large number of atoms interacting through a finite-range interatomic interaction. Physical Review. A **JCR**, v. 75, p. 042705, 2007. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 46 | **SCOPUS** 48

124

Fonseca, Tertius L. ; Coutinho, Kaline ; **Canuto, Sylvio** . Probing supercritical water with the n-?[sup. Journal of Chemical Physics, v. 126, p. 034508, 2007. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 22 | **SCOPUS** 20

125

Georg, Herbert C. ; Coutinho, Kaline ; **Canuto, Sylvio** . Solvent effects on the UV-visible absorption spectrum of benzophenone in water: A combined Monte Carlo quantum mechanics study including solute polarization. Journal of Chemical Physics, v. 126, p. 034507, 2007. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 107 | **SCOPUS** 103

126

Kundu, Anasuya ; Chakrabarti, Barnali ; Das, Tapan Kumar ; **Canut, Sylvio** . An approximate many-body calculation for trapped bosons with attractive interaction. Journal of Physics. B, Atomic, Molecular and Optical Physics **JCR**, v. 40, p. 2225-2239, 2007. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 21 | **SCOPUS** 22

127

Malaspina, Thaciana ; **Canuto, Sylvio** . On the relative abundance and interconversion of the two lowest isomers of AIP3. Chemical Physics Letters, v. 444, p. 247-251, 2007. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 3 | **SCOPUS** 3

128

Ludwig, Valdemir ; Coutinho, Kaline ; Canuto, Sylvio . A Monte Carlo-quantum mechanics study of the lowest $n\pi^*$ and $\pi\pi^*$ states of uracil in water. PCCP. Physical Chemistry Chemical Physics **JCR**, v. 9, p. 4907, 2007. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 51 | [SCOPUS](#) 52

129

CANUTO, S.; CABRAL, B J Costa ; Reply to comment on Δ The enthalpy of the O-H bond homolytic dissociation: Basis-set extrapolated density functional theory and coupled cluster calculations. Chemical Physics Letters (Print), v. 417, p. 570-572, 2006. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 9 | [SCOPUS](#) 6

130

CANUTO, S.; CHAUDHURI, P ; Rayleigh scattering properties of small polyglycine molecules. Journal of Molecular Structure. Theochem (Print) **JCR**, v. 760, p. 15-20, 2006. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 31 | [SCOPUS](#) 32

131

BORIN, A C ; SERRANOANDRÉS, L ; LUDWIG, V ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Theoretical Electronic Spectra of 2-Amino-Purine in Vapor and in Water. International Journal of Quantum Chemistry **JCR**, v. 106, p. 2564, 2006. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 18 | [SCOPUS](#) 20

132

CANUTO, S.; MALASPINA, T ; FILETI, e e ; RIVEROS, J M . Ab Initio Study of the Isomeric Equilibrium of the $\text{HCN}\cdot\text{A}\cdot\text{A}\cdot\text{H}$. The Journal of Physical Chemistry. A **JCR**, v. 110, p. 10303-10308, 2006. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 25 | [SCOPUS](#) 26

133

GEORG, H C ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Converged Electronic Polarization of Acetone in Liquid Water and the Role in the $n\pi^*$ Transition. Chemical Physics Letters (Print), v. 429, p. 119, 2006. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 74 | [SCOPUS](#) 80

134

CANUTO, S.; COUTO, P Cabral Do ; CABRAL, B J Costa . Electron binding energies of water clusters: Implications for the electronic properties of liquid water. Chemical Physics Letters (Print), v. 429, p. 129-135, 2006. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 26 | [SCOPUS](#) 25

135

LIMA, MARIA CAROLINA P. ; COUTINHO, Kaline ; Rocha, Willian R. ; ROCHA, W. R. ; CANUTO, S. . Reaction Mechanism and Tautomeric Equilibrium of 2-Mercaptopyrimidine in the Gas Phase and in Aqueous Solution: A Combined Monte Carlo and Quantum Mechanics Study. The Journal of Physical Chemistry. A **JCR**, v. 110, p. 7253-7261, 2006. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 42 | **SCOPUS** 44

136

RIVELINO, R ; CANUTO, S. . Theoretical Investigation of Hydrogen Bonding in Lactonitrile-Water Complexes. International Journal of Quantum Chemistry **JCR**, v. 103, p. 654, 2005. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 2 | **SCOPUS** 2

137

CANUTO, S.; FILETI, e e ; Ab initio NMR study of the isomeric hydrogen-bonded methanol-water complexes. International Journal of Quantum Chemistry **JCR**, v. 102, p. 554-564, 2005. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 16 | **SCOPUS** 19

138

CANUTO, S.; COUTINHO, K. ; MUKHERJEE, P.k. . The Dipole Polarizability of F(Negativo) in Aqueous Solution. A Sequential Monte Carlo-Quantum Mechanics Study. Advances in Quantum Chemistry **JCR**, v. 48, p. 141, 2005. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 6

139

CANUTO, S.; FILETI, e e ; Calculated infrared spectra of hydrogen-bonded methanol-water, water-methanol, and methanol-methanol complexes. International Journal of Quantum Chemistry **JCR**, v. 104, p. 808-815, 2005. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 31 | **SCOPUS** 35

140

CANUTO, S.; CABRAL, B J Costa ; The enthalpy of the O-H bond homolytic dissociation: Basis-set extrapolated density functional theory and coupled cluster calculations. Chemical Physics Letters (Print), v. 406, p. 300-305, 2005. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 41 | **SCOPUS** 41

141

RIVELINO, R ; CABRAL, B J Costa ; COUTINHO, K. ; CANUTO, S. . Electronic Polarization in Liquid Acetonitrile: A Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Investigation. Chemical Physics Letters (Print), v. 407, p. 13, 2005. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 44 | **SCOPUS** 47

142

.

CANUTO, S.; **UENO, L T** ; ROBERTONETO, O ; **MACHADO, F B C** . The low-lying electronic states of the GaN molecule. Chemical Physics Letters (Print), v. 413, p. 65-70, 2005. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 16 | **SCOPUS** 17

143

.

MALASPINA, T ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** . The Relative Stability of the Two Isomers of AIP3. Chemical Physics Letters (Print), v. 411, p. 14, 2005. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 7 | **SCOPUS** 7

144

.

GEORG, H C ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** . A Look Inside the Cavity of Hydrated Alfa-Cyclodextrin: A Computer Simulation Study. Chemical Physics Letters (Print), v. 413, p. 16, 2005. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 31 | **SCOPUS** 32

145

.

GEORG, H C ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** . A Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Study of the Hydrogen Bond Interaction and the Solvatochromic Shift of the n-pi* Transition of Acrolein in Water. The Journal of Chemical Physics, v. 123, p. 12430, 2005. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 41 | **SCOPUS** 41

146

.

LUDWIG, V ; MUKHERJEE, P.k. ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** . Spectral Shift of Sodium in a Liquid-Helium Environment: A Sequential Monte Carlo Time-Dependent Density-Functional-Theory Study. Physical Review. A **JCR**, v. 72, p. 06271, 2005. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 15 | **SCOPUS** 16

147

.

FILETI, e e ; **CANUTO, S.** . A Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Study of the Dipole Polarizability of Liquid Benzene. Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering **JCR**, v. 4, p. 559, 2004.

148

.

FILETI, e e ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** . Is There a Favourite Isomer for the Hydrogen-Bonded Methanol in Water?. Advances in Quantum Chemistry **JCR**, v. 47, p. 51, 2004. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 9 | **SCOPUS** 9

149

RIVELINO, R ; **CANUTO, S.** . Conformational Stability of Lactonitrile-Water Complexes: An Ab Initio Study. Journal of Physical Chemistry. A, Molecules, Spectroscopy, Kinetics, Environment, & General Theory **JCR**, v. 108, p. 1601, 2004. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 5 | **SCOPUS** 5

150

HERNANDEZ, M Z ; LONGO, R ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Solute Relaxation on the Solvatochromism of Ortho-Betaine Dyes. A Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Study. PCCP. Physical Chemistry Chemical Physics **JCR**, v. 6, p. 2088, 2004. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 26 | **SCOPUS** 27

151

COUTINHO, K. ; LUDWIG, V ; **CANUTO, S.** . Combined Monte Carlo and Quantum Mechanics Study of the Hydration of the Guanine-Cytosine Base Pair. Physical Review E. (Cessou em 2000. Cont. 1539-3755 Physical Review. E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics) **JCR**, v. 69, p. 61902, 2004. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 11 | **SCOPUS** 13

152

CANUTO, S.; FILETI, e e ; CHAUDHURI, P . Relative strength of hydrogen bond interaction in alcoholâwater complexes. Chemical Physics Letters (Print), v. 400, p. 494-499, 2004. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 132 | **SCOPUS** 137

153

LUDWIG, V ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Sequential Classical-Quantum Description of the Absorption Spectrum of the Hydrated Electron. Physical Review. B, Condensed Matter. (Cessou 1997. Cont. 1098-0121 Physical Review. B, Condensed Matter and Materials Physics) **JCR**, v. 70, p. 21411, 2004. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 20 | **SCOPUS** 21

154

COUTINHO, K. ; CABRAL, B J Costa ; **CANUTO, S.** . Can Larger Dipoles Solvate Less? Solute-Solvent Hydrogen Bond and the Differential Solvation of Phenol and Phenoxy. Chemical Physics Letters (Print), v. 399, p. 534, 2004. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 17 | **SCOPUS** 18

155

CANUTO, S.; **RISSI, E. ;** **RIVELINO, R .** Applications of density functional theory methods in millimeter-wave spectroscopy. International Journal of Quantum Chemistry **JCR**, v. 91, p. 575-585, 2003. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 11 | **SCOPUS** 10

156

CANUTO, S.; **FILETI, e e ;** **RIVELINO, R .** Rayleigh and Raman light scattering in hydrogen-bonded acetonitrile?water. Theoretical Chemistry Accounts (Print) **JCR**, v. 110, p. 360-366, 2003. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 19 | **SCOPUS** 18

157

COUTINHO, K. ; **GUEDES, R C ;** **CABRAL, B J Costa ;** **CANUTO, S.** . Electronic Polarization of Liquid Water: Converged Monte Carlo-Quantum Mechanics Results for the Multipole Moments. Chemical Physics Letters (Print), v. 369, p. 345, 2003. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 67 | **SCOPUS** 69

158

CANUTO, S.; **GUEDES, R C ;** **COUTINHO, K. ;** **CABRAL, B J Costa .** Differential Hydration of Phenol and Phenoxy Radical and the Energetics of the Phenol Oâ€žH Bond in Solution. The Journal of Physical Chemistry. B (1997 : Online) **JCR**, v. 107, p. 4304-4310, 2003. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 33 | **SCOPUS** 34

159

CANUTO, S.; **RIVELINO, R ;** **CHAUDHURI, P .** Quantifying multiple-body interaction terms in H-bonded HCN chains with many-body perturbation/coupled-cluster theories. The Journal of Chemical Physics, v. 118, p. 10593, 2003. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 68 | **SCOPUS** 70

160

COUTINHO, K. ; **CANUTO, S. .** The Sequential Monte Carlo-Quantum Mechanics Methodology. Application to the Solvent Effects in the Stokes Shift of Acetone in Water. Journal of Molecular Structure. Theochem (Print) **JCR**, v. 632, p. 235, 2003. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 82 | **SCOPUS** 85

161

CANUTO, S.; **RISSI, E.** ; **FILETI, e e** . Rayleigh light scattering of hydrogen bonded clusters investigated by means of ab initio calculations. Journal of Physics. B, Atomic Molecular and Optical Physics (Print) **JCR**, v. 36, p. 399-408, 2003. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** " 39 | **SCOPUS** 42

162

FILETI, e e ; **COUTINHO, K.** ; **MALASPINA, T** ; **CANUTO, S.** . Electronic Changes due to Thermal Disorder of Hydrogen Bonds in Liquids: Pyridine in an Aqueous Environment. Physical Review E. (Cessou em 2000. Cont. 1539-3755 Physical Review. E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics) **JCR**, v. 67, p. 61504, 2003. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** " 51 | **SCOPUS** 26

163

LUDWIG, V ; **COUTINHO, K.** ; **BORIN, A C** ; **CANUTO, S.** . Electronic Polarization of 1H-Benzotriazole in Water. Ground and First Excited State Dipole Moments. International Journal of Quantum Chemistry **JCR**, v. 95, p. 572, 2003. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** " 9 | **SCOPUS** 11

164

GUEDES, R C ; **COUTINHO, K.** ; **CABRAL, B J Costa** ; **CANUTO, S.** ; **CORREIA, C F** ; **SANTOS, R M B dos** ; **SIMÕES, J A M** . Solvent Effects on the Energetics of the Phenol O-H Bond: Differential Solvation of Phenol and Phenoxy Radical in Benzene and Acetonitrile. The Journal of Physical Chemistry. A **JCR**, v. 107, p. 9197, 2003. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** " 38 | **SCOPUS** 39

165

CANUTO, S.; **BORIN, A C** ; **SERRANOANDRÉS, L** ; **LUDWIG, V** . Theoretical absorption and emission spectra of 1H- and 2H-benzotriazole. PCCP. Physical Chemistry Chemical Physics (Print) **JCR**, v. 5, p. 5001, 2003. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** " 26 | **SCOPUS** 28

166

CHAUDHURI, P ; **CANUTO, S.** . An Ab Initio Study of the Peptide Bond Formation Between Alanine and Glycine: Electron Correlation Effects on the Structure and Binding Energy. Journal of Molecular Structure. Theochem (Print) **JCR**, v. 577, p. 267-279, 2002. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** " 29 | **SCOPUS** 28

167

SERRANO, A. ; **CANUTO, S.** . Solvent Effects in the First Dipole Hyperpolarizability of Phenol Blue. A Bond-Length Alternation Analysis. International Journal of Quantum Chemistry **JCR**, v. 87, p. 275, 2002. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** " 9 | **SCOPUS** 9

168

TRZESNIAK, D. ; CAIRES, A. C. F. ; ALMEIDA, P. C. ; **CANUTO, S.** . Theoretical and Experimental Study of the Spectroscopy Properties of the E-64 Protease Inhibitor. Journal of Molecular Structure. Theochem **JCR**, v. 585, p. 129, 2002. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 1 | **SCOPUS** 2

169

QUINTÃO, A D ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Theoretical Study of the Hydrogen Bond Interaction Between Methylene Blue and Water and Possible Role on Energy Transfer for Photodynamics. International Journal of Quantum Chemistry **JCR**, v. 90, p. 634, 2002. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 16 | **SCOPUS** 16

170

CHAUDHURI, P ; **CANUTO, S.** . Correlation Effects on Peptide Molecules. Indian Journal Of Physics, v. 76, p. 577, 2002.

171

CANUTO, S.; COUTINHO, K. ; TRZESNIAK, D. . New Developments in Monte Carlo/Quantum Mechanics Methodology. The Solvatochromism of Beta-Carotene in Different Solvents. Advances in Quantum Chemistry **JCR**, v. 41, p. 161, 2002. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 67 | **SCOPUS** 70

172

RIVELINO, R ; **LUDWIG, V** ; **CANUTO, S.** ; **RISSI, E.** . Theoretical Studies of Hydrogen Bonding in Water-Cyanides and in the Base Pair Gu-Cy. Journal of Molecular Structure (Print) **JCR**, v. 615, p. 259, 2002. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 14 | **SCOPUS** 14

173

CANUTO, S.; **SOUZA, L. E. S.** ; The equation of state of hard-spherocylinder fluid mixtures Electronic Supplementary Information available. See <http://www.rsc.org/suppdata/cp/b1/b109010k/>. PCCP. Physical Chemistry Chemical Physics (Print) **JCR**, v. 4, p. 922-925, 2002. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 6 | **SCOPUS** 7

174

ROCHA, W R ; MARTINS, V. M. ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Solvent Effects on the Electronic Absorption Spectrum of Formamide Studied by a Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Approach. Theoretical Chemistry Accounts **JCR**, v. 108, p. 31, 2002. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 39 | **SCOPUS** 41

175

MALASPINA, T ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Ab initio Calculation of Hydrogen Bonds in Liquids. A Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Study of Pyridine in Water. The Journal of Chemical Physics, v. 117, p. 1692, 2002. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 93 | [SCOPUS](#) 97

176

CANUTO, S.; RIVELINO, R ; COUTINHO, K. . A Monte Carlo-Quantum Mechanics Study of the Solvent-Induced Spectral Shift and the Specific Role of Hydrogen Bonds in the Conformational Equilibrium of Furfural in Water. The Journal of Physical Chemistry. B (1997 : Online) [JCR](#), v. 106, p. 12317-12322, 2002. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 42 | [SCOPUS](#) 46

177

COUTINHO, K. ; SAAVEDRA, N. ; SERRANO, A. ; **CANUTO, S.** . A Monte Carlo-Quantum Mechanics Study of the Spectroscopic Properties of Molecules in Solution. Journal of Molecular Structure. Theochem (Print) [JCR](#), v. 539, p. 171-179, 2001. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 23 | [SCOPUS](#) 25

178

CANUTO, S.; ALMEIDA, K. J. ; COUTINHO, K. ; ALMEIDA, W. B. ; ROCHA, W R . A Monte Carlo quantum mechanical study of the solvatochromism of pyrimidine in water and in carbon tetrachloride. PCCP. Physical Chemistry Chemical Physics (Print) [JCR](#), v. 3, p. 1583-1587, 2001. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 42 | [SCOPUS](#) 42

179

ROCHA, W R ; COUTINHO, K. ; ALMEIDA, W. B. ; **CANUTO, S.** . An Efficient Quantum Mechanical/Molecular Mechanics Monte Carlo Simulation of Liquid Water. Chemical Physics Letters (Print), v. 335, p. 127-133, 2001. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 44 | [SCOPUS](#) 49

180

ROCHA, W R ; ALMEIDA, K. J. ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . The Electronic Spectrum of N-Methylacetamide in Aqueous Solution: A Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanical Study. Chemical Physics Letters (Print), v. 345, p. 171-178, 2001. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 37 | [SCOPUS](#) 38

181

RIVELINO, R ; **CANUTO, S.** . Theoretical Study of the Mixed Hydrogen-Bonded Complexes: H₂O-HCN-H₂O and H₂O-HCN-H₂O. The

182

.

SOUZA, L. E. S. ; CANUTO, S. . Efficient Estimation of Second Virial Coefficients of Fused Hard-Spheres Molecules by an Artificial Neural Network. PCCP. Physical Chemistry Chemical Physics (Print) **JCR**, v. 3, p. 4762, 2001. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 4 | SCOPUS 5

183

.

★ **COUTINHO, K. ; CANUTO, S. ; ZERNER, M. C. .** A Monte Carlo-Quantum Mechanics Study of the Solvatochromic Shifts of the Lowest Transition of Benzene. The Journal of Chemical Physics, v. 112, p. 9874-9880, 2000. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 151 | SCOPUS 155

184

.

★ **CANUTO, S.; COUTINHO, K. ; ZERNER, M. C. .** Including dispersion in configuration interaction-singles calculations for the spectroscopy of chromophores in solution. The Journal of Chemical Physics, v. 112, p. 7293, 2000. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 48 | SCOPUS 51

185

.

URAHATA, S. ; CANUTO, S. . Monte Carlo-Quantum Mechanics Study of the UV-Visible Spectrum of Benzophenone in Water. International Journal of Quantum Chemistry **JCR**, v. 80, p. 1062-1067, 2000. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 19 | SCOPUS 20

186

.

RIVELINO, R ; CANUTO, S. . An Ab Initio Study of the Hydrogen Bonded H₂O : HCN and HCN : H₂O Isomers. Chemical Physics Letters (Print), v. 322, p. 207-212, 2000. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 35 | SCOPUS 33

187

.

CANUTO, S.; ABREU, E. P. ; CASTRO, M. A. ; COSTA, M. F. . Calculated Infrared, Raman, and Rayleigh Properties of the CO₃ Molecule. Journal of Molecular Spectroscopy (Print) **JCR**, v. 202, p. 281-284, 2000. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 4 | SCOPUS 4

188

.

COUTINHO, K. ; CANUTO, S. . Solvent Effects in Emission Spectroscopy: A Monte Carlo Quantum Mechanics Study of the n → π(*) Shift of Formaldehyde in Water. The Journal of Chemical Physics,

189

.

CANUTO, S.; **COUTINHO, K.** . From Hydrogen Bond to Bulk: Solvation Analysis of the n-pi* Transition of Formaldehyde in Water. International Journal of Quantum Chemistry **JCR**, v. 77, p. 192-198, 2000. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 94 | [SCOPUS](#) 97

190

.

★ **COUTINHO, K.** ; **SAAVEDRA, N.** ; **CANUTO, S.** . Theoretical Description of the Hydrogen Bond Interaction Between Acetone and Water. Journal of Molecular Structure. Theochem (Print) **JCR**, v. 466, p. 69, 1999. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 65 | [SCOPUS](#) 70

191

.

CUNHA, C. ; **CANUTO, S.** . Ground State Structure of C(5)H(5) and van der Waals Interaction with He and Ne. Journal of Molecular Structure. Theochem (Print) **JCR**, v. 464, p. 73, 1999. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 10 | [SCOPUS](#) 10

192

.

SERRANO, A. ; **CANUTO, S.** . Calculated Raman and Rayleigh Properties of the CaC Molecule. Journal of Molecular Structure. Theochem (Print) **JCR**, v. 489, p. 29, 1999. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 4 | [SCOPUS](#) 4

193

.

★ **URAHATA, S.** ; **CANUTO, S.** . Monte Carlo Study of the Temperature Dependence of the Hydrophobic Hydration of Benzene. Chemical Physics Letters (Print), v. 313, p. 235, 1999. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 29 | [SCOPUS](#) 30

194

.

CANUTO, S.; **COUTINHO, K.** ; **OLIVEIRA, M. J.** ; **CANUTO, S.** . Sampling Configurations in the Monte Carlo Simulation of Solvent Effects. International Journal of Quantum Chemistry **JCR**, v. 66, p. 249, 1998. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 61 | [SCOPUS](#) 64

195

.

CANUTO, S.; CUNHA, C. ; CANUTO, S. . Theoretical Analysis of the Structure and Bonding of the van der Waals N(2) ... C(5)H(5) Cluster. Physics Letters. A (Print) **JCR**, v. 241, p. 90, 1998. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 1 | **SCOPUS** 1

196

.

CANUTO, S.; PIQUINI, P. ; FAZZIO, A. . Electronic and Structural Trends in Small AsGa Clusters. Nanostructured Materials, v. 10, p. 635, 1998. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 40 | **SCOPUS** 38

197

.

CANUTO, S.; SERRANO, A. . Structure-Dependence of the Low-Lying Excited States and the First Dipole Hyperpolarizability of Phenol Blue. International Journal of Quantum Chemistry **JCR**, v. 70, p. 745, 1998. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 14 | **SCOPUS** 3

198

.

CANUTO, S.; SERRANO, A. . Calculated Polarizabilities and Gradients: Rayleigh and Raman Scattering Activities for the MgH Molecule. Journal of Molecular Structure. Theochem (Print) **JCR**, v. 432, p. 69, 1998. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 3 | **SCOPUS** 3

199

.

CANUTO, S.; CANUTO, S. . Electron Correlation Effects on the Angular Momentum Anisotropies of the Dipole Polarizability of First-Row Atomic Anions. International Journal of Quantum Chemistry **JCR**, v. 63, p. 459, 1997. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 2

200

.

CANUTO, S.; URAHATA, S. ; COUTINHO, K. ; CANUTO, S. . Hydrophobic Effect and Solvatochromic Shift in the First Absorption Band of Benzene in Water. Chemical Physics Letters (Print), v. 274, p. 269, 1997. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 18 | **SCOPUS** 19

201

.

CANUTO, S.; COUTINHO, K. ; CANUTO, S. ; ZERNER, M. C. . Calculation of the Absorption Spectrum of Benzene in Condensed Phase. A Study of the Solvent Effects. International Journal of Quantum Chemistry **JCR**, v. 65, p. 885, 1997. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 31 | **SCOPUS** 33

202

.

CANUTO, S.; SILVA, J. L. F. ; CANUTO, S. . The Frequency-Dependence of the First Dipole Hyperpolarizability of Dimethylaminoindoline. Journal of Molecular Structure. Theochem (Print) **JCR**, v. 384, p. 181, 1997.

203

.

CANUTO, S.; SERRANO, A. ; CANUTO, S. . Quest for the ground state characterization of CaC. Chemical Physics Letters (Print), v. 269, p. 193-198, 1997. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 16 | **SCOPUS** 16

204

.

★ **CANUTO, S.; COUTINHO, K. ; CANUTO, S.** . Solvent Effects from a Sequential Monte Carlo-Quantum Mechanical Approach. Advances in Quantum Chemistry **JCR**, v. 28, p. 89, 1997. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 160 | **SCOPUS** 164

205

.

CANUTO, S.; COUTINHO, K. ; ZERNER, M. C. . Calculation of Spectroscopic Shifts of Non-Polar Molecules upon Solvation Using QM/MM and Reaction Field QM Methods. American Chemical Society. Abstracts of Papers (at the National Meeting), v. 214, p. 221, 1997.

206

.

CANUTO, S.; SILVA, A. F. ; DANTAS, N. S. ; MOTA, F. B. ; CANUTO, S. ; FAZZIO, A. . Impurity States in the Narrow Band-Gap Semiconductor N-Type InSb. Solid State Communications **JCR**, v. 99, p. 295, 1996. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 2 | **SCOPUS** 2

207

.

CANUTO, S.; MOTA, R. ; CECHIN, J. C. ; CANUTO, S. ; FAZZIO, A. . Metal-Insulator Transition in Fullerenes: K(3)C(60) versus Na(3)C(60). International Journal of Quantum Chemistry, v. 29, p. 217, 1995.

208

.

CANUTO, S.; COUTINHO, K. ; CANUTO, S. ; MOTA, R. ; FAZZIO, A. . Cluster Calculations of the Electronic Structure of K(3)C(60). Modern Physics Letters B **JCR**, v. 9, p. 95, 1995. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 2

209

.

CANUTO, S.; CANUTO, S. . A Detailed Theoretical Analysis of the Electron Correlation Contribution to the Static Dipole Hyperpolarizabilities of Atomic Anions. Journal of Molecular Structure. Theochem (Print) **JCR**, v. 335, p. 45, 1995. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** ³

210

.

CANUTO, S.; PIQUINI, P. ; FAZZIO, A. ; CANUTO, S. . Ab Initio Self-Consistent-Field Studies of the Structure, Energetics and Bonding of Small Gallium-Arsenide Clusters. Zeitschrift für Physik. B, Condensed Matter, v. 33, p. 125, 1995. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** ⁶

211

.

CANUTO, S.; VENEZUELA, P. P. M. ; **FAZZIO, A. ; CANUTO, S.** . Configurational and Electronic Properties of Amorphous Semiconductors. Brazilian Journal of Physics (Impresso) **JCR**, v. 24, p. 942, 1994.

212

.

CANUTO, S.; **PIQUINI, P. ; FAZZIO, A. ; CANUTO, S.** . Structural and Energetic Studies of Ga(3)As(3), Ga(3)As(4) and Ga(4)As(3). International Journal of Quantum Chemistry, v. 28, p. 571, 1994.

213

.

CANUTO, S.; **CANUTO, S.** . Extreme Electron Correlation Effects on the Electric Properties of Atomic Anions. International Journal of Quantum Chemistry, v. 28, p. 265, 1994.

214

.

CANUTO, S.; **CANUTO, S. ; CASTRO, M. A.** . Infrared intensity and Raman scattering activity for the SiC molecule. Physics Letters. A (Print) **JCR**, v. 187, p. 243-246, 1994. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** ¹ | **SCOPUS** ²

215

.

CANUTO, S.; **CANUTO, S. ; CASTRO, M. A. ; MUKHERJEE, P.K.** . Isotropic and Anisotropic Static Dipole Polarizabilities of the First-Row Stable Atomic Anions. Physical Review. A **JCR**, v. 49, p. 3515, 1994. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** ¹⁵ | **SCOPUS** ¹⁰

216

.

CANUTO, S.; **LIMA, G. A. R.** ; **KINTOP, J. A.** ; **FAZZIO, A.** ; **CANUTO, S.** . Theoretical Investigation of the Electronic Structure and Absorption Spectra of Carbon Cluster Nanotubes. Nanostructured Materials, v. 4, p. 11, 1994. **Citações:** **SCOPUS** 1

217

.

COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Estudo Teórico de Espectroscopia de Absorção de Líquidos Moleculares. Química Nova **JCR**, v. 17, p. 480, 1994.

218

.

CASTRO, M. A. ; **CANUTO, S.** . Calculated Dipole Moment, Static Dipole Polarizability, Infrared Intensity and Raman Scattering Activity for the MgC Molecule. Journal of Physics. B, Atomic Molecular and Optical Physics (Print) **JCR**, v. 26, p. 4301, 1993. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 10 | **SCOPUS** 10

219

.

CUNHA, C. ; **CANUTO, S.** ; **FAZZIO, A.** . The Role Played by N and N-N Impurities in Type-IV Semiconductors. Physical Review. B, Condensed Matter. (Cessou 1997. Cont. 1098-0121 Physical Review. B, Condensed Matter and Materials Physics) **JCR**, v. 48, p. 17806, 1993. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 25 | **SCOPUS** 29

220

.

CANUTO, S.; **CASTRO, M. A.** ; **SINHA, K.** . Theoretical Determination of the Spectroscopic Constants of CaH(+). Physical Review. A **JCR**, v. 48, p. 2463, 1993. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 20 | **SCOPUS** 20

221

.

CANUTO, S.; **SILVA, A. F.** . Influence of donor-triad molecules on the optical properties of semiconductors. Physical Review. B, Condensed Matter. (Cessou 1997. Cont. 1098-0121 Physical Review. B, Condensed Matter and Materials Physics) **JCR**, v. 48, p. 18261-18263, 1993. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 6 | **SCOPUS** 8

222

.

GHOSH, T. ; **DAS, A. K.** ; **CASTRO, M. A.** ; **CANUTO, S.** ; **MUKHERJEE, P.K.** . Dynamic Polarizabilities and Rydberg States of Argon Isoelectronic Sequence. Physical Review. A **JCR**, v. 48, p. 2686, 1993. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** 21 | **SCOPUS** 20

223

.

COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Theoretical Description of the Absorption Spectra of Solid and Liquid Benzene. Journal of Molecular Structure. Theochem (Print) **JCR**, v. 287, p. 99, 1993. **Citações:** **SCOPUS** 5

224

.

CASTRO, M. A. ; **CANUTO, S.** . Coupled-Cluster Calculation of the Static Polarizabilities and Hyperpolarizabilities of Magnesium. Physics Letters. A (Print) **JCR**, v. 176, p. 105, 1993. **Citações:** **WEB OF SCIENCE™** 15 | **SCOPUS** 14

225

.

CASTRO, M. A. ; **CANUTO, S.** . Dipole Moment, Polarizability, and Their Derivatives for the SiC Molecule. Physical Review. A **JCR**, v. 48, p. 826, 1993. **Citações:** **WEB OF SCIENCE™** 7 | **SCOPUS** 6

226

.

FAZZIO, A. ; **CUNHA, C. R. M.** ; **CANUTO, S.** . Electronic and Structural Properties of N and N(2) in Type-IV Semiconductors. International Journal of Quantum Chemistry, v. 26, p. 667, 1992.

227

.

CASTRO, M. A. ; **CANUTO, S.** ; MÜLLERPLATHE, F. . Many-Body Perturbation Theory Calculation of the Microwave and Vibrational Constants of CaC. Physical Review. A **JCR**, v. 46, p. 4415, 1992. **Citações:** **WEB OF SCIENCE™** 15 | **SCOPUS** 15

228

.

FAZZIO, A. ; **CUNHA, C. R. M.** ; **CANUTO, S.** . Ab Initio Cluster Calculation of Hyperfine Interactions and Total-Energy Surfaces for N in Diamond, Silicon and Germanium. Materials Science Forum **JCR**, v. 83-87, p. 463, 1992. **Citações:** **SCOPUS** 2

229

.

DU, P. ; AXE, F. U. ; LOEW, G. H. ; **CANUTO, S.** ; ZERNER, M. C. . Theoretical Study on the Electronic Spectra of Model Compound-II Complexes of Peroxidases. Journal of the American Chemical Society (Print) **JCR**, v. 113, p. 8614, 1991. **Citações:** **WEB OF SCIENCE™** 29 | **SCOPUS** 27

230

.

CASTRO, M. A. ; CANUTO, S. ; SIMAS, A. M. . Many-Body Perturbation Theory and Coupled-Cluster Calculations of the Ground State Structure of CO(3). Chemical Physics Letters (Print), v. 177, p. 98, 1991. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 17 | [SCOPUS](#) 15

231

.

CANUTO, S.; CASTRO, M. A. ; MÜLLERPLATHE, F. . Theoretical determination of the spectroscopic constants of the MgC molecule. Astrophysical Journal (Online) [JCR](#), v. 367, p. L69, 1991. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 21 | [SCOPUS](#) 25

232

.

CANUTO, S.; ZERNER, M. C. ; DIERCKSEN, G. H. F. . Theoretical Studies of the Absorption Spectra of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. The Astrophysical Journal [JCR](#), v. 377, p. 150, 1991. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 14 | [SCOPUS](#) 16

233

.

SILVA, A. F. ; CANUTO, S. . Effect of Three-Donor Cluster on Infrared Absorption of Semiconductor Systems. Solid State Communications [JCR](#), v. 75, p. 9391, 1990. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 3 | [SCOPUS](#) 3

234

.

FAZZIO, A. ; ANTONELLI, A. ; PAULA JR, H. F. ; CANUTO, S. . Many-Electron Treatment for Chalcogen Complexes in Silicon. Semiconductor Science and Technology (Print) [JCR](#), v. 5, p. 196, 1990.

235

.

CANUTO, S.; ZERNER, M. C. . Theoretical Interpretation of the Absorption and Ionization Spectra of the Paracyclophanes. Journal of the American Chemical Society (Print) [JCR](#), v. 112, p. 2114, 1990. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 49 | [SCOPUS](#) 46

236

.

CANUTO, S.; ZERNER, M. C. . On the inter-ring separation of the lowest excited and ionized states of [2.2]paracyclophane. Chemical Physics Letters (Print), v. 157, p. 353-358, 1989. **Citações:** [WEB OF SCIENCE](#) 18 | [SCOPUS](#) 15

237

.

CANUTO, S.; GEERTSEN, J. ; MÜLLERPLATHE, F. ; SCUSERIA, G. E. . Coupled Cluster Polarization Propagator Study of the Photodetachment Cross Section of Li(-). Journal of Physics. B, Atomic Molecular and Optical Physics (Print) **JCR**, v. 21, p. 3891, 1988.

238

.

MCDERMOTT, S. D. ; LALLY, J. M. ; SPILLANE, W. J. ; CRONIN, D. ; CAPLAN, P. ; **CANUTO, S.** . Photosubstitution Studies in Deactivated Aromatics. Absence of Photovalence Isomerization in Chlorobenzene. Journal of Chemical Research. Synopses **JCR**, v. 142, 1988.

239

.

CANUTO, S.; DUCH, W. ; GEERTSEN, J. ; MÜLLERPLATHE, F. ; ODDERSHEDE, J. ; SCUSERIA, G. E. . The Dipole Polarizability of Li(-). Chemical Physics Letters (Print), v. 147, p. 435, 1988.

240

.

LIMA, E. G. ; **CANUTO, S.** . Correlated Calculations of the Electron Affinity of HC(2). International Journal of Quantum Chemistry, v. 22, p. 199, 1988.

241

.

LIMA, E. G. ; **CANUTO, S.** . A Comparison of Different Many-Body Perturbation Theory Calculations of the Ground State of SiS. International Journal of Quantum Chemistry, v. 33, p. 395, 1988.

242

.

CANUTO, S.; MAKIUCHI, M. ; FAZZIO, A. . Intra-d excitations: Comparison between approaches for impurities in semiconductors. Physical Review. B, Condensed Matter. (Cessou 1997. Cont. 1098-0121 Physical Review. B, Condensed Matter and Materials Physics) **JCR**, v. 37, p. 4770-4773, 1988. **Citações:** **WEB OF SCIENCE** ³ | **SCOPUS** ⁴

243

.

CANUTO, S.; DIERCKSEN, G. H. F. . Many-Body Perturbation Theory and Polarization Propagator Studies of the Structure, Energetics and Excitation Spectrum of CO(3). Chemical Physics (Print) **JCR**, v. 120, p. 375, 1988.

244

.

LIMA, E. G. ; **CANUTO, S.** . The Structure of HSSi(+) as Determined by Fourth-Order Many-Body Perturbation Theory. Chemical Physics Letters (Print), v. 144, p. 362, 1988.

245

.

LIMA, E. G. ; **CANUTO, S.** . A Complete Fourth-Order Many-Body Perturbation Theory Study of the Ground State of SiS. Química Nova **JCR**, v. 11, p. 59, 1988.

246

.

CANUTO, S.. Finite-Field Hartree-Fock Calculations of Atomic and Molecular Polarizabilities. Brazilian Journal of Physics (Impresso) **JCR**, v. 18, p. 121, 1988.

247

.

CANUTO, S.; DIERCKSEN, G. H. F. . Many-Body Studies of the Structure and Spectra of CO(3). International Journal of Quantum Chemistry, v. 21, p. 759, 1987.

248

.

CANUTO, S.. The Absorption Spectrum of Benzene and Some Benzene-Like Systems. Acta Sud Am Química, v. 6, p. 47, 1986.

249

.

CANUTO, S.; FAZZIO, A. . Many-electron treatment of the off-center substitutional O in Si. Physical Review. B, Condensed Matter. (Cessou 1997. Cont. 1098-0121 Physical Review. B, Condensed Matter and Materials Physics) **JCR**, v. 33, p. 4432-4435, 1986. **Citações:**
WEB OF SCIENCE™ 13 | SCOPUS 13

250

.

CESAR, A. ; DANTAS, L. B. ; **CANUTO, S.** . A Core-Excited Rydberg State of SiF. Journal of Molecular Structure. Theochem (Print) **JCR**, v. 139, p. 109, 1986.

251

.

CHACON, M. R. ; **CANUTO, S.** . Vibrational Line-Width of F(1s) Core-Hole States. Chemical Physics Letters (Print), v. 120, p. 86, 1985. **Citações:** WEB OF SCIENCE™ 5 | SCOPUS 2

252

.

CESAR, A. ; **CANUTO, S.** . Relaxation and Vibrational Structure in the Deepest Ionized States of SiS. Journal of Molecular Structure. Theochem (Print) **JCR**, v. 133, p. 221, 1985.

253

.

CESAR, A. ; CANUTO, S. . Theoretical Study of the Core-Ionized States of NF. Brazilian Journal of Physics (Impresso) **JCR**, v. 14, p. 114, 1984.

254

.

SILVA, J. R. ; CANUTO, S. . The Virial Theorem and the Factorized Wave Function Approach to Perturbation Theory. Applications to the Spherical Stark and Spherical Quadratic Zeeman Problems in Hydrogen. Physics Letters. A (Print) **JCR**, v. 106, p. 1, 1984. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 10 | **SCOPUS** 7

255

.

GOMES, M. A. F. ; CANUTO, S. . Macroscopic Description of Molecular Structural Changes. Journal of Physics. B, Atomic Molecular and Optical Physics (Print) **JCR**, v. 17, p. 1711, 1984. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 1 | **SCOPUS** 1

256

.

SILVA, J. R. ; CANUTO, S. . On the Spherical Quadratic Zeeman Problem in Hydrogen. Physics Letters. A (Print) **JCR**, v. 101, p. 326, 1984. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 18 | **SCOPUS** 17

257

.

CHACON, M. R. ; CANUTO, S. . Vibrational Excitation of Tripler Core-Ionized States of BeF. Chemical Physics (Print) **JCR**, v. 87, p. 17, 1984. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 4 | **SCOPUS** 4

258

.

CANUTO, S.. Semi-Empirical Study of the Interacting Potentials for $H(+) + CO$ and $H(+) + NO(+)$. Brazilian Journal of Physics (Impresso) **JCR**, v. 13, p. 747, 1983.

259

.

CANUTO, S.. On the $n(+)pi^*(B(3u)) - n(-)pi(B(2g))$ Splitting in Pyrazine. Brazilian Journal of Physics (Impresso) **JCR**, v. 13, p. 73, 1983.

260

.

BRAGA, M. ; **CANUTO, S.** ; GOMES, M. A. F. . Renner Splitting in the First Ionized States of BeF(2). Chemical Physics Letters (Print), v. 101, p. 55, 1983. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 4 | [SCOPUS](#) 4

261

.

CANUTO, S.; REYES, L. M. . Vibrational Excitation Following the S(1s) Core Ionization of CS. Chemical Physics Letters (Print), v. 96, p. 591, 1983.

262

.

SILVA, J. R. ; **CANUTO, S.** . Another Approach to the Spherical Stark Problem in Hydrogen. Physics Letters. A (Print)**JCR**, v. 88, p. 282, 1982. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 10 | [SCOPUS](#) 9

263

.

ANDERSON, W. P. ; EDWARDS, W. D. ; ZERNER, M. C. ; **CANUTO, S.** . A Comparison of Different Theoretical Models for Interpreting the Photoelectron Spectrum of Borazine. Chemical Physics Letters (Print), v. 88, p. 185, 1982.

264

.

GOMES, M. A. F. ; **CANUTO, S.** . Structural Phase Transition in Molecules. Journal of Physics. B, Atomic Molecular and Optical Physics (Print)**JCR**, v. 15, p. 1307, 1982. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 9 | [SCOPUS](#) 10

265

.

CANUTO, S.; BRAGA, M. . Electronic Splitting Between the (3)B(2) and (3)A(2) States of BeF(2). Journal of Molecular Structure. Theochem (Print)**JCR**, v. 88, p. 209, 1982.

266

.

REYES, L. M. ; **CANUTO, S.** . Electronic States of Silabenzene. Journal of Molecular Structure**JCR**, v. 89, p. 77, 1982.

267

.

MULLER, J. ; AGREN, H. ; **CANUTO, S.** . Ab Initio Studies of the Photodissociations in the First Excited States A(1)A(1)a(3)A(1) of PH(3). Journal of Chemical Physics, v. 76, p. 5060, 1982. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 24 | [SCOPUS](#) 22

268

MALTA, O. L. ; GAMA, A. A. S. ; CANUTO, S. . Theoretical Calculations of Lanthanides 4f-4f Intensities. Brazilian Journal of Physics (Impresso) **JCR**, v. 12, p. 563, 1982.

269

CANUTO, S.. Quebra de Simetria em Hartree-Fock: Soluções Localizadas em Moléculas. Brazilian Journal of Physics (Impresso) **JCR**, v. 12, p. 459, 1982.

270

CANUTO, S.. Spin-Unrestricted Hartree-Fock Study of the Ground State of BeF(-)(2). Journal of Physics. B, Atomic Molecular and Optical Physics (Print) **JCR**, v. 14, p. 3537, 1981.

271

CANUTO, S.; CALAIS, J. L. ; GOSCINSKI, O. . Alternating Polarity and Friedel Oscillations. Journal of Physics. B, Atomic Molecular and Optical Physics (Print) **JCR**, v. 14, p. 1409, 1981. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 21 | **SCOPUS** 19

272

MULLER, J. ; CANUTO, S. . Theoretical Studies of Photodissociation and Rydbergization in the First Triplet State (3sA(2) of Ammonia. Chemical Physics Letters (Print), v. 70, p. 236, 1980. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 29 | **SCOPUS** 27

273

CANUTO, S.; GOSCINSKI, O. ; ZERNER, M. C. . Broken Orbital Symmetry Study of Low-Lying Excited and N(1s) Ionized States of Pyrazine. Chemical Physics Letters (Print), v. 68, p. 232, 1979. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 41 | **SCOPUS** 33

274

CANUTO, S.. Study of the Predissociation of NH(3) in the 3sA(2) State from Ab Initio UHF Calculations. Journal of Physics. B, Atomic Molecular and Optical Physics (Print) **JCR**, v. 12, p. 3149, 1979. **Citações:** **WEB OF SCIENCE**™ 16 | **SCOPUS** 13

275

CANUTO, S.; GOSCINSKI, O. . Continuum Contribution to Polarizabilities and Scaling. International Journal of Quantum Chemistry, v. 16, p. 985, 1979. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 2 | [SCOPUS](#) 2

276

CANUTO, S.; GOSCINSKI, O. . Stationarity of Resonant Pole Trajectories in Complex Scaling. International Journal of Quantum Chemistry, v. 14, p. 383, 1978. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 15 | [SCOPUS](#) 13

277

CANUTO, S.; VIANNA, J. D. M. . New Basis Set for Molecular Calculation: A Study of AHn Molecules Using the Complete Neglect of Differential Overlap Method of Boyd and Whitehead. Journal of Physics. B, Atomic Molecular and Optical Physics (Print) **JCR**, v. 8, p. 2987, 1975. **Citações:** [WEB OF SCIENCE™](#) 1 | [SCOPUS](#) 1

Livros publicados/organizados ou edições

1.

CABRAL, BENEDITO J. C. ; **COUTINHO, K. ; Canuto, S.** . Quantum Modeling of Complex Molecular Systems. 21. ed. Springer International Publishing, 2015. v. 21. 21p .

2.

CANUTO, S.. Combining Quantum Mechanics and Molecular Mechanics. Some Recent Progresses in QM/MM Methods. Advances in Quantum Chemistry, 2010. v. 59.

3.

COUTINHO, Kaline ; Canuto, Sylvio . Practical Aspects of Computational Chemistry. 1. ed. Springer Netherlands, 2010. v. 1. 17p .

4.

CANUTO, S.. Solvation Effects on Molecules and Biomolecules. Computational Methods and Applications. Alemanha: Springer, 2008. 536p .

5.

CANUTO, S.; CUSTÓDIO, R (Org.) ; BRÄNDAS, E (Org.) . XII Brazilian Symposium of Theoretical Chemistry (Special Issue) - International Journal of Quantum Chemistry. , 2005. v. 103.

6.

VIANNA, José David M ; FAZZIO, Adalberto ; CANUTO, S. . Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos - Simulação Computacional. 1ª. ed. São Paulo, SP: Editora Livraria da Física, 2004. v. 1. 401p .

7.

CANUTO, S.; BARBOSA, M (Org.) . Water - The Essential Molecule (Special Edition) - Brazilian Journal of Physics. 1. ed. São Paulo: Sociedade Brasileira de Física, 2004. v. 34.

8.

CANUTO, S.; SMEYERS, Y (Org.) . VII Brazilian Symposium of Theoretical Chemistry (Special Issue) - Journal of Molecular Structure (Theochem). , 1995. v. 335.

9.

CANUTO, S.; **CANUTO, S.** (Org.) ; **FAZZIO, A.** (Org.) . Computer Simulation in Physics: Electronic Structure of Matter. 4. ed. , 1994. v. 24.

10.

CANUTO, S.; CASTRO, J. D. (Org.) ; PAIXÃO, F. J. (Org.) . Electronic Structure of Atoms, Molecules and Solids; II Brazilian School on Electronic Structure. 1. ed. Cingapura: World Cientific, 1990. v. 1. 170p .

11.

CANUTO, S.; **FAZZIO, A.** (Org.) ; VIANNA, J. D. M. (Org.) ; BRESCANSIN, L. M. (Org.) . I Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica. 1. ed. Brasília: Editora Universidade de Brasília, 1989. v. 1. 557p .

Capítulos de livros publicados

1.

LACERDA JR, E. ; **CANUTO, S.** ; **COUTINHO, K.** . New insights on nonlinear solvatochromism in binary mixture of solvents. In: Elsevier. (Org.). Advances in Quantum Chemistry. 1ed.Cambridge: Academic Press, 2022, v. 85, p. 57-80.

2.

Cardenuto, Marcelo Hidalgo ; COUTINHO, Kaline ; Canuto, Sylvio . Quantum Chemistry with Thermodynamic Condition. A Journey into the Supercritical Region and Approaching the Critical Point. In: Advances in Quantum Chemistry. (Org.). Quantum Chemistry with Thermodynamic Condition. A Journey into the Supercritical Region and Approaching the Critical Point. 1ed.: Elsevier, 2017, v. 74, p. 253-265.

3.

Cardenuto, Marcelo Hidalgo; COUTINHO, Kaline ; Cabral, Benedito J.C. ; CANUTO, SYLVIO . Electronic Properties in Supercritical Fluids. In: Advances in Quantum Chemistry. (Org.). Electronic Properties in Supercritical Fluids. 1ed.: Elsevier, 2015, v. 71, p. 323-339.

4.

Georg, H. C. ; Fernandes, T. S. ; **Canuto, S.** ; Takenaka, N. ; Kitamura, Y. ; Nagaoka, M. . A Combination of the Sequential QM/MM and the Free Energy Gradient Methodologies with Applications. Practical Aspects of Computational Chemistry III. 1ed.: Springer US, 2014, v. , p. 231-247.

5.

COUTINHO, K. ; **Fonseca, Tertius L.** ; **CANUTO, S.** . Molecules in Different Environments: Solvatochromic Effects Using Monte Carlo Simulation and Semi-Empirical Quantum Mechanics Calculations. Approximate Molecular Orbital Methods. : Edward A. Boudreaux, Transworld Research, 2010, v. , p. 63-84.

6.

CANUTO, S.. A Sequential Monte Carlo-Quantum Mechanics Study of the Dipole Polarizability of LIquid Benzene. In: G. Maroulis. (Org.). Computational Aspects of Eletric Polarizability Calculations: Atoms, Molecules and Clusters. Amsterdam: IOS Press, 2009, v. , p. -.

7.

COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Sequential Monte Carlo and Quantum Mechanics Calculation of the Static Dielectric Constant of Liquid Argon. In: J.Leszczynski and M.K.Shukla. (Org.). Pratical Aspects of Computacional Chemistry. Esatdos Unidos: Springer, 2009, v. , p. -.

8.

COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** ; MUKHERJEE, P.k. ; B.Fricke . Spectroscopy of Atoms in Liquid Helium Environment: A Theoretical Perspective. In: P.Piecuch. (Org.). Progress in Theoretical Chemistry and Physics. Esatdos Unidos: Springer, 2009, v. , p. 185-202.

9.

COUTINHO, K. ; **RIVELINO, R.** ; **GEORG, H C.** ; **CANUTO, S.** . The Sequential QM/MM Method and its Applications to Solvent Effects in electronic and Structural Properties of Solutes. Solvation Effects in Molecules and Biomolecules. Estados Unidos: Springer, 2008, v. 000, p. 159-189.

10.

COUTINHO, K. ; **FONSECA, T. L.** ; **CANUTO, S.** . Molecules in Different Environments: Solvatochromic Effects Using Monte Carlo Simulation and semi-Empirical Quantum Mechanical Calculations. In: E.

11.

BARRETO, R C ; **CANUTO, S.** ; **COUTINHO, K.** ; **GEORG, H C.** . Molecular Polarization in Liquid Environment. In: G. Maroulis and T. Simos. (Org.). Trends and Perspectives in Modern Computational Science. : Brill Academic Publishers, 2007, v. 6, p. 80-90.

12.

CASTRO, M. A. ; **CANUTO, S.** . O Método de Hartree-Fock. In: Nelson H. Morgon; Kaline Coutinho. (Org.). Métodos de Química Quântica e Modelagem Molecular. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2007, v. 0001, p. 000-.

13.

CASTRO, M. A. ; **CANUTO, S.** . Métodos Perturbativos para a Obtenção de Correlação eletrônica. In: Nelson H. Morgon; Kaline Coutinho. (Org.). Métodos de Química Quântica e Modelagem Molecular. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2007, v. 000, p. -.

14.

GEORG, H C ; **CANUTO, S.** . Métodos Híbridos para Modelagem do Ambiente Molecular. In: Nelson H. Morgon; Kaline Coutinho. (Org.). Métodos de Química Quântica e Modelagem Molecular. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2007, v. 0000, p. -.

15.

LUDWIG, V. ; **CANUTO, S.** . The dipole polarizability of uracil in aqueous solution. A sequential Monte Carlo/quantum mechanics study. Electric and Magnetic Properties of Atoms and Molecules. Estados Unidos: Brill Academic Publishers, 2007, v. 3, p. 215-222.

16.

COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . A Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Study of the Dipole Polarizability of Atomic Liquids. The Argon Case. In: G. Maroulis. (Org.). Theoretical approaches to the calculation of electric polarizability. 000ed.Londres: Imperial College Press, 2006, v. 0000, p. 405-420.

17.

CANUTO, S.. A Física e a Ciência Molecular. In: Antonio José Roque da Silva; Gil da Costa Marques; Hélio Dias; Sérgio F. Novaes. (Org.). Física - Tendências e Perspectivas. 1ªed.São Paulo: Editora Livraria da Física, 2005, v. 1, p. 205-215.

18.

COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . A Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Study of the Dipole Polarizability of Atomic Liquids. The

19.

CANUTO, S.; **COUTINHO, K. ;** **CABRAL, B J Costa** . Hydrogen Bonding and the Energetics of Homolytic Dissociation in Solution. A Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Approach. In: Erkki J. Brändas; Eugene S. Kryachko. (Org.). Fundamental World of Quantum Chemistry. A Tribute Volume to the Memory of Per-Olov Löwdin. : Kluwer Academic Publishers, 2004, v. 3, p. 581-599.

20.

CANUTO, S.; **COUTINHO, K. ;** **TRZESNIAK, D.** . van der Waals interaction probed by solvatochromic shifts. In: M. Manmohan. (Org.). Current Developments in Atomic, Molecular and Chemical Physics with Applications. 1ed.New York: ed. Kluwer Plenum, 2002, v. 1, p. 127-131.

21.

CANUTO, S. Estrutura de Átomos, Moléculas e Biomoléculas. In: Mahir S Hussein; Silvio R A Salinas. (Org.). Cem Anos de Mecânica Quântica. 1ed.São Paulo: Editora Livraria da Física, 2001, v. 1, p. 75-99.

Textos em jornais de notícias/revistas

1.

CANUTO, S. Os Mistérios da Água - O que pensa o expert. França Flash, São Paulo, p. 5 - 5, 01 abr. 2005.

2.

CANUTO, S. Por Dentro dos Fullerenos. Ciência Hoje, Rio de Janeiro, , v. 18, p. 7 - 9, 01 out. 1994.

3.

CANUTO, S. Orientação Molecular por Campo Elétrico. Ciência Hoje, Rio de Janeiro, , v. 14, p. 14, 01 ago. 1991.

4.

CANUTO, S. Universidade, Ciência e Tecnologia. Ciência e Tecnologia, Santa Maria, , v. 2, p. 55 - 58, 30 jul. 1991.

5.

CANUTO, S. Universidade, Ciência e Tecnologia. Jornal do Commercio, Recife, 12 jun. 1991.

6.

COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Estudos Teóricos de Espectroscopia de Absorção de Líquidos Moleculares. Química Nova, , v. 17, p. 480 - 482.

7.

Fabio Cozman ; Claudio Pinhanez ; **Canuto, S.** . Um Centro de Pesquisa para Inteligência Artificial Avançada no Brasil. Interesse Nacional, www.interessenacional.com.br, p. 36 - 40.

Resumos publicados em anais de congressos

1.

ANDRADE FILHO, T S ; MARTINS, H S ; GESTER, R M ; FERREIRA, R ; **COSTA, S C S** ; NERO, J Del ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** . A Sequential Monte Carlo Quantum Mechanics Calculations of Trans-Resveratrol in Aqueous Solution. In: XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2006, São Lourenço, MG, 2006.

2.

GESTER, R M ; FERREIRA, R C ; SOUZA, A Saraiva ; NERO, J Del ; **COUTINHO, K.** ; **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, 2006, São Lourenço, MG, 2006.

3.

GESTER, R M ; FERREIRA, R C ; SOUZA, A Saraiva ; NERO, J Del ; **COUTINHO, K.** ; **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, 2006, São Lourenço, MG, 2006.

4.

COSTA, S C S ; SILVA, S B C ; GALEMBECK, A ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** ; NERO, J Del . Sol-Gel/POPOP Supramolecular Optoelectronic Device. In: XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2006, São Lourenço, MG, 2006.

5.

MARTINS, H S ; ANDRADE FILHO, T S ; NERO, J Del ; **COUTINHO, K.** ; **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, 2006, São Lourenço, MG, 2006.

6.

COSTA, S C S ; SILVA, S B C ; GALEMBECK, A ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** ; NERO, J Del . Sensores de Gás em Sol-Gel Incorporados com Indicadores Azo. In: XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2006, São Lourenço, MG, 2006.

7.

COSTA, S C S ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** ; OLIVEIRA, R J ; FAUSTINO, W M ; GALEMBECK, A ; SILVA, A Sampaio ; NERO, J Del . Investigação Teórica/Experimental de Novos Dispositivos Orgânicos via Sol-Gel. In: XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2006, São Lourenço, MG, 2006.

8.

CHAUDHURI, P ; **CANUTO, S.** . Density Functional Study on the Structure, Energetics and Conformational Behavior of Glycine Homopolypeptides and Glycine Cluster in Gas Phase. In: XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2006, São Lourenço, MG, 2006.

9.

FERREIRA, R ; GESTER, R M ; MARTINS, H S ; ANDRADE FILHO, T S ; ATHAYDE FILHO, T L ; NERO, J Del ; SILVA, S B C ; GALEMBECK, A ; **COUTINHO, K.** ; **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, 2006, São Lourenço, MG, 2006.

10.

FONSECA, T. L. ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** . Estrutura e Interação da Ligação de Hidrogênio Formada entre Acetona e Água Supercrítica. In: IV Workshop em Física Molecular e Espectroscopia, 2006, Salvador, BA. Resumos da Conferência, 2006.

11.

COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Utilização de Método Híbrido QM/MM para Estudar Efeitos de Solventes em Espectroscopia Eletrônica. In: IV Workshop em Física Molecular e Espectroscopia, 2006, Salvador, BA. Resumos da Conferência, 2006.

12.

LUDWIG, V. ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** . Photophysical Properties of Uracil in Gas and in Aqueous Solution. In: IV Workshop em Física Molecular e Espectroscopia, 2006, Salvador, BA. Resumos da Conferência, 2006.

13.

MALASPINA, T ; **CANUTO, S.** . Efeito Solvente na Transição Eletrônica do Formaldeído em Água. In: IV Workshop em Física Molecular e Espectroscopia, 2006, Salvador, BA. Resumos da Conferência, 2006.

14.

GEORG, H C ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Polarização do Sóluto e o Efeito do Solvente no Espectro Eletrônico. In: IV Workshop em Física Molecular e Espectroscopia, 2006, Salvador, BA. Resumos da Conferência, 2006.

15.

GEORG, H C ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . A Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Study of the Solvatochromic Shifts of Acrolein in Water. In: 45th Sanibel Symposium, 2005, Saint Simons Island, Georgia, 2005.

16.

CANUTO, S.; COUTINHO, K. . Solvent Effects on UV-VIS Absorption Spectra Using Sequentially Monte Carlo and TD-DFT Calculations. In: 45th Sanibel Symposium, 2005, Saint Simons island, Georgia, 2005.

17.

GESTER, R ; SILVA, R ; AGRIPINO, P ; MOREIRA, S ; NERO, J Del ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Interação Beta-Caroteno e Ácido Oléico: Investigação Experimental e Monte Carlo/Simulação Espectroscópica. In: XXVIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2005, Santos, SP, 2005.

18.

CHAUDHURI, P ; **CANUTO, S.** . A Comparative Study on the Properties of Polyglycine in a Solvent Free Environment. In: XXVIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2005, Santos, SP, 2005.

19.

MALASPINA, T ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . The Relative Stability of the Two Isomers of AIP3. In: XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2005, São Pedro, SP, 2005.

20.

GEORG, H C ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Acrolein in Water: The Contribution of Hydrogen Bond and Solvation Shells to the n- π^* Shift. In: XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2005, São Pedro, SP, 2005.

21.

LUDWIG, V ; BORIN, A C ; SERRANOANDRÉS, L ; **CANUTO, S.** . The UV Absorption and Emission Spectra of 2-Aminopurine Revised. In: XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2005, São Pedro, SP, 2005.

22.

BARRETO, R C ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Polarização Eletrônica em Líquidos. O Momento de Dipolo da Acetona. In: XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2005, São Pedro, SP, 2005.

23.

NERO, J Del ; GESTER, R ; FERREIRA, R C ; GEORG, H C ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Methyl Orange in Aqueous Environment: A Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Investigation. In: XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2005, São Pedro, SP, 2005.

24.

LIMA, M C P ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** ; ROCHA, W R . Mecanismo de Reação e Equilíbrio Tautomérico da 2-Mercaptopirimidina em Fase Gasosa e em Solução. In: XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2005, São Pedro, SP, 2005.

25.

GESTER, R ; MARTINS, H S ; NERO, J Del ; MOREIRA, S ; SILVA, R ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Investigação Experimental e Simulação Monte Carlo/Mecânica Quântica de Ácidos Graxos e Trans Beta-Caroteno. In: XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2005, São Pedro, SP, 2005.

26.

MORAES, T F ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Utilização de Teoria de Perturbação Termodinâmica para Estudar Processos de Dissociação de Aglomerados em Solução Aquosa. In: XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2005, São Pedro, SP, 2005.

27.

CANUTO, S.; COUTINHO, K. . Hydrogen Bond and its Influence on Molecular Properties in Explicit Liquid Environment. In: XXXI Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, 2005, Isla de Margarita, Venezuela. Livro de Resumos, 2005.

28.

MALASPINA, T ; **CANUTO, S.** . Estudo das Ligações de Hidrogênio Formadas em Aglomerados de Pirazina e Água nas Fases Gasosa e Líquida. In: II Escola de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos, 2004, Petrópolis, RJ, 2004.

29.

LUDWIG, V ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Efeitos do Meio Aquoso na Estrutura e na Energia do Complexo Guanina-Citosina. In: II Escola de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos, 2004, Petrópolis, RJ.

30.

MALASPINA, T ; **CANUTO, S.** . Estudo Teórico Usando Monte Carlo-Mecânica Quântica do Espectro UV-vis da Molécula de Pirazina em

31.

FILETI, e e ; CANUTO, S. . Estudo Ab Initio das Propriedades Elétricas e Ópticas de Complexos Envolvendo Alcool e Água. In: XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2004, Poços de Caldas, MG, 2004.

32.

LUDWIG, V ; COUTINHO, K. ; CANUTO, S. . Accurate Classical-Quantum Simulation for the Absorption Spectrum of the Hydrated Electron. In: XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2004, Poços de Caldas, MG, 2004.

33.

RIVELINO, R ; CANUTO, S. . Estabilidade Conformacional de Complexos Moleculares de Lactonitrila e Água. In: IX Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, 2004, Salvador, BA, 2004.

34.

QUINTÃO, A D ; CANUTO, S. . Estudo Estrutural e Espectroscópico de Dioxinas Originadas da Combustão do PVC. In: IX Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, 2004, Salvador, BA, 2004.

35.

CANUTO, S.; COUTINHO, K. . Solvents as Explicit Liquids Using a Sequential Monte Carlo-Quantum Mechanics Methodology. In: 43th Sanibel Symposium, 2003, St. Augustine, Flórida, EUA, 2003.

36.

LUDWIG, V ; COUTINHO, K. ; CANUTO, S. . Solvent Effects on Hydrogen Bonds of Biomolecules. In: XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2003, Caxambu, MG, Brasil. Livro de Resumos, 2003. v. XXVI. p. 52.

37.

RIVELINO, R ; RISSI, E. ; FILETI, e e ; CANUTO, S. . Spectroscopic Properties of Hydrogen Bonded Molecular Clusters. In: XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2003, Caxambu, MG, Brasil. Livro de Resumos. v. XXVI. p. 82.

38.

CANUTO, S. . Modeling Molecules in the Liquid Environment. In: XVth International Conference on Horizons in Hydrogen Bond Research, 2003, Berlim, Alemanha, 2003.

39.

MORAES, T F ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Estudo Teórico da Solvatação Hidrofílica do Ânion Carboxilato. In: XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2003, Caxambu, MG, 2003.

40.

GEORG, H C ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Theoretical Investigation of the Absorption Spectrum of DMACA in Water. In: XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2003, Caxambu, MG, 2003.

41.

MALASPINA, T ; **CANUTO, S.** . Nova Estrutura para Ligação de Hidrogênio entre Pirazina e Água. In: XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2003, Caxambu, MG, 2003.

42.

FILETI, e e ; **CANUTO, S.** . Um Estudo Ab Initio das Propriedades NMR das Ligações de Hidrogênio dos Complexos CH₃HO H₂O e CH₃OH OH₂. In: XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2003, Caxambu, MG, 2003.

43.

LUDWIG, V ; **CANUTO, S.** . Hydrated Electron: A Theoretical Study. In: XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2003, Caxambu, MG, 2003.

44.

BORIN, A C ; SERRANOANDRÉS, L ; LUDWIG, V ; **CANUTO, S.** . The UV Absorption Spectrum of Benzotriazole Tautomers. In: XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2003, Caxambu, MG, 2003.

45.

RIVELINO, R ; **CANUTO, S.** . Dissociação de Agregados Moleculares de Lacto-Nitrila com Água. In: XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2003, Caxambu, MG, 2003.

46.

MORAES, T F ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Estudo Teórico das Ligações de Hidrogênio do Ânion Carboxilato em Meio Aquoso. In: VI Congresso de Iniciação Científica, 2003, Mogi das Cruzes, SP, 2003.

47.

SANTOS, C C dos ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** . Implementação de Interface Gráfica em JAVA para Analisar Sistemas Moleculares Densos. In: 10a. Jornada Nacional de IC - 55ª Reunião Anual da SBPC, 2003, Recife, PE, 2003.

48.

LUDWIG, V ; **BORIN, A C** ; **CANUTO, S.** . Estudo Teórico do Efeito de Solvente na Molécula 1H-BENZOTRIAZOL. In: VIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, 2002, Juiz de Fora, MG, Brasil. Livro de Resumos da Conferência. v. VIII. p. 21.

49.

RISSI, E. ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** . Propriedades Eletrônicas do Dímero URÉIA-AGUA: Comparação Líquido, Gás e Aglomerado. In: VIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, 2002, Juiz de Fora, MG, Brasil. Livro de Resumos. v. VIII. p. 46.

50.

FILETI, E. ; **RIVELINO, R** ; **CANUTO, S.** . Caracterização dos Efeitos de Ligação de Hidrogênio na Depolarização do Espalhamento Rayleigh por Aglomerados Moleculares. In: VIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, 2002, Juiz de Fora, MG, Brasil. Livro de Resumos. v. VIII. p. 73.

51.

MALASPINA, T ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** . Estudo Clássico-Quântico de Ligações de Hidrogênio em Meio Líquido: Piridina em Solução Aquosa. In: VIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, 2002, Juiz de Fora, MG, Brasil. Livro de Resumos. v. VIII. p. 77.

52.

RIVELINO, R ; **CHAUDHURI, P** ; **CANUTO, S.** . Many-Body Interactions and Correlation Effects in H-Bonded Molecular Clusters. In: XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2002, Caxambu, MG, Brasil. Livro de Resumos, 2002. v. XXV. p. 11.

53.

CANUTO, S. . Monte Carlo-Quantum Mechanics Studies of Molecules in Solution. In: Current Developments in Atomic, Molecular and Chemical Physics, 2002, New Deilhi, Índia, 2002.

54.

CANUTO, S. . Hydrogen Bonds in Explicit Liquid Environment Using a Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Methodology. In: XXVIII Congresso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (Quitel 2002), 2002, Montevideo, Uruguai, 2002.

55.

RIVELINO, R ; **CANUTO, S.** . Hydrogen Bonding in Small Molecular Clusters. In: XIV Conference-Workshop Horizons in Hydrogen Bond Research, 2001, Torino, Itália, 2001.

56.

CANUTO, S.. Monte Carlo/Quantum Mechanics Studies of Hydrogen Bonds in Liquids. In: XIV Conference-Workshop Horizons in Hydrogen Bond Research, 2001, Torino, Itália, 2001.

57.

COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Hybrid Sequential Monte Carlo-Quantum Mechanics Studies: Analysis of Conformational and Electronic Changes of Molecules in Solution. In: XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2001, Caxambu, MG, Brasil. Livro de Resumos, 2001.

58.

FILETI, E. ; FILETI, T ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** . Determinação da Primeira Hiperpolarizabilidade da Molécula de Piridina em Água. In: XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2001, Caxambu, MG, Brasil. Livro de Resumos, 2001.

59.

MALASPINA, T ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** . Estudo Comparativo entre Aglomerados e Líquidos. Aplicação para Piridina e Água. In: XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2001, Caxambu, MG, Brasil. Livro de Resumos, 2001.

60.

LUDWIG, V ; **CANUTO, S.** ; **BORIN, A C** ; **SERRANOANDRÉS, L** ; **ROTH, W** . The Lowest Electronic States of 1H and 2H-Benzotriazole. In: XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2001, Caxambu, MG, Brasil. Livro de Resumos, 2001.

61.

MENDES, I ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** . Utilizando Monte Carlo para Estudar Mudanças Conformacionais de Sistemas Moleculares. In: XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2001, Caxambu, MG, Brasil. Livro de Resumos, 2001.

62.

QUINTÃO, A D ; **CANUTO, S.** . Estudo Teórico da Molécula de Azul de Metileno em Meio Solvente: Propriedades Estruturais e Espectroscópicas, Formação de Agregados e Interações de Hidrogênio. In: XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2001, Caxambu, MG, Brasil. Livro de Resumos, 2001.

63.

RISSI, E. ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** . Efeito de Solvente na Espectroscopia de Absorção da Uréia em Água e Comparação Cluster

64.

TRZESNIAK, D. ; COUTINHO, K. ; CANUTO, S. . A Study of the Intense Electronic Absorption Transition of the β -Carotene Molecule in Solvents. In: XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2001, Caxambu, MG, Brasil. Livro de Resumos, 2001.

65.

COUTINHO, K. ; CANUTO, S. . Efeitos do Meio em Solução. In: XXVII Congresso de Químicos Teóricos de Expressión Latina (QUITEL 2001), 2001, Toulouse, França, 2001.

66.

CANUTO, S.. Fazendo Ciência no Computador. In: XXIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2000, São Lourenço, MG, Brasil. Livro de Resumos, 2000. p. 8.

67.

COUTINHO, K. ; CANUTO, S. . Novos Desenvolvimentos em Técnicas de Simulação para Estudar Líquidos Moleculares. In: XXIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2000, São Lourenço, MG, Brasil. Livro de Resumos, 2000. p. 60.

68.

FILETI, e e ; CANUTO, S. ; COUTINHO, K. . Parametrização de Potencial Lennard-Jones para o Oxigênio Molecular. In: XXIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2000, São Lourenço, MG, Brasil. Livro de Resumos, 2000. p. 67.

69.

QUINTÃO, A D ; CANUTO, S. . Estudo das Propriedades Estruturais e Espectroscópicas de Algumas Moléculas da Família das Fenotiazinas. In: XXIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2000, São Lourenço, MG, Brasil. Livro de Resumos, 2000. p. 14.

70.

RISSI, E. ; RIVELINO, R ; CANUTO, S. . Propriedades Estruturais e Eletrônicas de Fosfinas e Nitrilas. In: XXIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2000, São Lourenço, MG, Brasil. Livro de Resumos, 2000. p. 75.

71.

CANUTO, S.. Studies of Solvent Effects Using Monte Carlo/Quantum Mechanics. In: Symposium in Memory of Michael C. Zerner, 2000, Gainesville, Flórida, EUA, 2000.

72.

COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Métodos Clássicos e Quânticos no Estudo de Propriedades de Moléculas Isoladas e em Solução. In: XXVI Congresso Internacional dos Químicos Teóricos de Expressión Latina (QUITEL 2000), 2000, Caxambu, MG, Brasil, 2000.

73.

RIVELINO, R ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Structure, Equilibrium and Electronic Properties of 2-Furfuraldehyde in Explicit Solvents. In: XXVI Congresso Internacional dos Químicos Teóricos de Expressión Latina (QUITEL 2000), 2000, Caxambu, MG, Brasil, 2000.

74.

CANUTO, S.; CASTRO, M. A. . Métodos Perturbativos em Estrutura Eletrônica. In: VII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, 2000, Goiânia, GO, 2000.

75.

LUDWIG, V ; **CANUTO, S.** . Propriedades Espectroscópicas da Interação Guanina-Citosina. In: VII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, 2000, Goiânia, GO, 2000.

76.

TRZESNIAK, D. ; **CANUTO, S.** ; COUTINHO, K. . Estudo da Interação entre Enzima e Inibidor. In: VII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, 2000, Goiânia, GO, 2000.

77.

RISSI, E. ; **CANUTO, S.** . Estrutura e Ligações de Hidrogênio entre Nitrilas e Água. In: VII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, 2000, Goiânia, GO, 2000.

78.

FILETI, T M ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Estudo das Propriedades Eletrônicas da Piridina em Solução Aquosa. In: VII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, 2000, Goiânia, GO, 2000.

79.

MENDES, I P ; **CANUTO, S.** ; COUTINHO, K. . Utilizando Monte Carlo para Estudar Mudanças Conformacionais de Sistemas Moleculares. In: VII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, 2000, Goiânia, GO, 2000.

80.

RIVELINO, R ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Estrutura, Equilíbrio e Propriedades Eletrônicas do 2-Furfuraldeído. In: VII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, 2000, Goiânia, GO, 2000.

81.

QUINTÃO, A D ; **CANUTO, S.** . Propriedades Estruturais e Espectroscópicas do Azul de Metileno. In: VII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, 2000, Goiânia, GO, 2000.

82.

COSTA, M. F. ; **CANUTO, S.** . Solvent Effect and Emission Spectra the Excited State of Formaldehyde in Water. In: XXII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1999, São Lourenço, MG, Brasil. Livro de Resumos, 1999.

83.

FILETI, E. ; **CANUTO, S.** ; CASTRO, M. A. . Um Estudo das Propriedades Elétricas e Ópticas da Molécula de O4. In: XXII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1999, São Lourenço, MG, Brasil. Livro de Resumos, 1999.

84.

SERRANO, A. ; **CANUTO, S.** . The Spectrum of Phenol Blue in Polar and Nonpolar Solvents. In: XXII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1999, São Lourenço, MG, Brasil. Livro de Resumos, 1999.

85.

URAHATA, S. ; **CANUTO, S.** . Estudo do Efeito Solvente no Espectro Eletrônico da Benzofenona. In: XXII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1999, São Lourenço, MG, Brasil. Livro de Resumos, 1999.

86.

COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** ; ZERNER, M. C. . The Effect of Neighboring Solvent Molecules on the Structural and Electronic Properties of Chromophores. In: Quantum Chemistry Symposium - Sanibel Symposia, 1998, St. Augustine, Flórida, EUA, 1998.

87.

COUTINHO, K. ; SAAVEDRA, N. ; SERRANO, A. ; URAHATA, S. ; **CANUTO, S.** . Solvent Effects in Molecular Structure and Properties. In: XXIV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, 1998, Puebla, México, 1998.

88.

SERRANO, A. ; CANUTO, S. . Structure-Dependence of the Low-Lying Excited States and the First Dipole Hyperpolarizability of Phenol Blue. In: Quantum Chemistry Symposium - Sanibel Symposia, 1998, St. Augustine, Flórida, EUA, 1998.

89.

COUTINHO, K. ; CANUTO, S. . Theoretical Study of the Hydrogen Bond Interaction Between Acetone and Water and Its Influence in the Solvatochromism of the $n - \pi^*$ Transition of the Absorption Spectrum. In: XXI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1998, Caxambu, MG, Brasil. Programas e Resumos, 1998. p. 68.

90.

CUNHA, C. ; CANUTO, S. . Interações de van der Waals do C₅H₅ com He e Ne. In: XXI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1998, Caxambu, MG, Brasil. Programas e Resumos, 1998. p. 57.

91.

SAAVEDRA, N. ; CANUTO, S. . Propriedades de Azinas em Meio Solvente. In: XXI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1998, Caxambu, MG, Brasil. Programas e Resumos, 1998. p. 55.

92.

SERRANO, A. ; CANUTO, S. . O Espectro Teórico de Absorção UV da Molécula de Dimethylaminoindoaniline em Solução. In: XXI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1998, Caxambu, MG, Brasil. Programas e Resumos, 1998. p. 59.

93.

URAHATA, S. ; CANUTO, S. . O Efeito Hidrofóbico: Uma Análise dos Clusters Benzeno-Agua. In: XXI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1998, Caxambu, MG, Brasil. Programas e Resumos, 1998. p. 58.

94.

CANUTO, S.; COUTINHO, K. ; ZERNER, M. C. . Study of Solvatochromic Shifts in Molecular Absorption Spectra Using a Discrete Model of Solvents. In: Sanibel Symposium, 1997, St. Augustine, Flórida, EUA, 1997.

95.

COUTINHO, K. ; CANUTO, S. . Estudo Teórico do Espectro de Absorção e de Propriedades Configuracionais do Benzeno Líquido. In: XX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1997, Caxambu, MG, Brasil. Programas e Resumos, 1997. p. 53.

96.

CUNHA, C. ; CANUTO, S. . Estudo Teórico dos Clusters de van der Waals C₅H₅ (N₂,He,Ne). In: XX Encontro Nacional de Física da Matéria

97.

MEDEIROS, R ; **CANUTO, S.** . Cálculo de Polarizabilidade de Dipolo Utilizando Teoria do Funcional da Densidade e Teoria de Perturbação de Muitos Corpos. In: XX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1997, Caxambu, MG, Brasil. Programas e Resumos, 1997. p. 42.

98.

PIQUINI, P. ; **CANUTO, S.** ; FAZZIO, A. . Electronic and Structural Trends in Small GaAs Clusters. In: XX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1997, Caxambu, MG, Brasil. Programas e Resumos, 1997. p. 56.

99.

SAAVEDRA, N. ; **CANUTO, S.** . Estudo Teórico das Propriedades Elétricas de Azinas em Meio Solvente. In: XX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1997, Caxambu, MG, Brasil. Programas e Resumos, 1997. p. 41.

100

.

SERRANO, A. ; **CANUTO, S.** . Simulação de Monte Carlo da Molécula de Dimethylaminoindoaniline Dissolvida em Clorofórmio. In: XX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1997, Caxambu, MG, Brasil. Programas e Resumos, 1997. p. 45.

101

.

URAHATA, S. ; **COUTINHO, K.** ; **CANUTO, S.** . Interação Hidrofóbica e o Shift Solvatocrômico do Benzeno em Água. In: XX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1997, Caxambu, MG, Brasil. Programas e Resumos, 1997. p. 43.

102

.

COUTINHO, K. ; OLIVEIRA, M J ; **CANUTO, S.** . Seleção de Estruturas de Monte Carlo para Cálculos Quânticos de Efeito Solvente. In: XIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1996, Águas de Lindóia, SP, Brasil. Programas e Resumos, 1996. p. 439.

103

.

CUNHA, C. ; **CANUTO, S.** . Forças de Dispersão na Interação Apolar do Radical Ciclopentadienil com o Dímero de Nitrogênio. In: XIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1996, Águas de Lindóia, SP, Brasil. Programas e Resumos, 1996. p. 302.

104

.

DANTAS, N. S. ; MOTA, F ; **CANUTO, S.** ; FAZZIO, A. ; ALVES, A ; PEPE, I ; SILVA, A F . Estados de Impureza Tipo-N em Semicondutores InSb de Gap Estreito. In: XIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1996, Aguas de Lindóia, SP, Brasil. Programas e Resumos, 1996. p. 607.

105

.

PAIVA, G ; VENEZUELA, P ; **CANUTO, S.** ; FAZZIO, A. . Estabilidade Térmica de Nano-Estrutura de Carbono. In: XIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1996, Aguas de Lindóia, SP, Brasil. Programas e Resumos, 1996. p. 486.

106

.

SAAVEDRA, N. ; **CANUTO, S.** . Resposta Óptica Não-Linear de Moléculas Orgânicas. In: XIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1996, Aguas de Lindóia, SP, Brasil. Programas e Resumos, 1996. p. 303.

107

.

SERRANO, A. ; **CANUTO, S.** . Determinação do Estado Fundamental do Monocarbeto de Cálcio. In: XIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1996, Aguas de Lindóia, SP, Brasil. Programas e Resumos, 1996. p. 299.

108

.

URAHATA, S. ; COUTINHO, K. ; **CANUTO, S.** . Estudo Teórico de Efeitos de Solvente no Espectro de Absorção do Benzeno. In: XIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1996, Aguas de Lindóia, SP, Brasil. Programas e Resumos, 1996. p. 305.

109

.

CANUTO, S., Aspectos Computacionais no Cálculo de Estrutura Eletrônica de Átomos e Moléculas. In: XVIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1995, Caxambu, MG, Brasil. Programas e Resumos, 1995. p. 13.

110

.

MOTA, R. ; CECHIN, J C ; **CANUTO, S.** ; FAZZIO, A. . Transição Metal-Isolante em Fullerenos Dopados com Metais Alcalinos. In: XVIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1995, Caxambu, MG, Brasil. Programas e Resumos, 1995. p. 326.

111

.

PAIVA, G ; VENEZUELA, P ; FAZZIO, A ; **CANUTO, S.** . Estudos de Estabilidade Estrutural em Nanotubos. In: XVIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1995, Caxambu, MG, Brasil. Programas e Resumos, 1995. p. 5.

112

.

CANUTO, S.. Electric Properties of Atomic Anions. In: Quantum Theory Project, 1994, Gainesville, Flórida, EUA, 1994.

113

.

FAZZIO, A. ; LIMA, G. A. R. ; KINTOP, J A ; **CANUTO, S.** . Electronic Structure and Absorption Spectra of Carbon Nanotubes. In: 22nd International Conference on the Physics of Semiconductors, 1994, Vancouver, Canadá, 1994.

114

.

MOTA, R. ; **CANUTO, S.** ; FAZZIO, A. . Metal-Insulator Transition in Fullerenes: K₃C₆₀ versus Na₃C₆₀. In: High Correlated System - LNLS, 1994, Campinas, São Paulo, Brasil, 1994.

115

.

PIQUINI, P. ; **CANUTO, S.** ; FAZZIO, A. . Structural and Electronic Studies of Ga₃As₃, Ga₄As₃ and Ga₃As₄. In: Sanibel Symposium Quantum Theory Project, 1994, Flórida, EUA, 1994.

116

.

FAZZIO, A. ; PIQUINI, P. ; **CANUTO, S.** . Structural and Electronic Studies of Ga₃As₃, Ga₄As₃ and Ga₃As₄. In: XVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1994, Caxambu, MG, Brasil, 1994.

117

.

FAZZIO, A. ; VENEZUELA, P ; **CANUTO, S.** . Simulação Configuracional e Estrutura Eletrônica de Semicondutores Amorfos. In: XVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1994, Caxambu, MG, Brasil, 1994.

118

.

FAZZIO, A. ; CANUTO, S. ; PIQUINI, P. ; MOTA, F. B. ; SILVA, A. F. . Absorção Óptica de Sistemas Semicondutores Duplamente Dopados. In: XVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1994, Caxambu, MG, Brasil, 1994.

119

.

FAZZIO, A. ; CANUTO, S. ; COUTINHO, K. . The Electronic Structure of Superconducting K3C60. In: XVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 1994, Caxambu, MG, Brasil, 1994.

120

.

CANUTO, S.; COUTINHO, K. ; FAZZIO, A. ; MOTA, R. . The UV and Visible Absorption Spectra of Clusters of K3C60. In: Fullerenes'93 - The First International Interdisciplinary Colloquium on the Science and Technology of the Fullerenes, 1993, Santa Barbara, Califórnia, EUA, 1993.

121

.

CUNHA, C R ; FAZZIO, A. ; CANUTO, S. . Electronic and Structural Properties of N and N2 in Type-IV Semiconductors. In: Sanibel Symposia on Quantum Chemistry and Solid State Physics, 1992, St. Augustine, Flórida, EUA, 1992.

Apresentações de Trabalho

1.

Canuto, S. Colóquio: Theoretical Studies of Molecular Spectroscopy in Simple and Complex Environments. 2022. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

2.

Canuto, S. (Invited Speaker) Molecular Spectroscopy in Simple Fluids and Complex Environments. 2021. (Apresentação de Trabalho/Congresso).

3.

Canuto, S. (Open Lecture) Theoretical studies of molecular spectroscopy in simple liquids and complex environments. 2021. (Apresentação de Trabalho/Simpósio).

4.

Canuto, S. Colóquio: Simulation of Molecular Spectroscopy in Simple and Complex Environments. 2021. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

5.

Canuto, S. Colóquio: Simulation of Molecular Spectroscopy in Simple and Complex Environments. 2021. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

6.

Canuto, S. Palestra: Modelagem de Espectroscopia e Reatividade de Moléculas em Meios Líquido e Complexos. 2021. (Apresentação de Trabalho/Simpósio).

7.

LACERDA JR, E. ; SAUER, Stefan ; **COUTINHO, Kaline** ; **Sylvio Canuto** . ?Theoretical Study of the Xenon NMR Chemical Shift in Supercritical Condition: many-body, electron-correlation and relativistic effects? (Poster) XVIII SBQT. 2017. (Apresentação de Trabalho/Congresso).

8.

S. Canuto. Light absorption and structural aspects of photosynthetic pigment in explicit solvent environment. 2014. (Apresentação de Trabalho/Congresso).

9.

Sylvio Canuto. Sequential Multiscale (QM/MM) Approach to Study Molecular Properties and Spectroscopy in Solvent Environment. 2014. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

10.

Sylvio Canuto. Panorama da Pós-Graduação em Astronomia/Física no Brasil. 2014. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

11.

Canuto, S. (Invited Speaker) Light Absorption and Structural Aspects of Photosynthetic Pigments in Solvent Environment. 2014. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

12.

S. Canuto; CABRAL, B. J. C. ; **COUTINHO, K.** ; Jaramillo P. . Light absorption and structural aspects of chlorophyll in explicit solvent environment. 2013. (Apresentação de Trabalho/Congresso).

13.

Sylvio Canuto. Physics and Astronomy in Brazil. 2013. (Apresentação de Trabalho/Congresso).

14.

Sylvio Canuto. Água. 2013. (Apresentação de Trabalho/Congresso).

15.

Sylvio Canuto. Estudos Clássico-Quântico (QM/MM) de Espectroscopia Molecular e Propriedades de Pigmentos Fotossintéticos. 2013. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

16.

Sylvio Canuto. Estudos Teóricos do Espectro de Absorção de Pigmentos Fotossintéticos. 2013. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

17.

Sylvio Canuto. Estrutura Eletrônica de Líquidos e Fluidos Supercríticos. 2013. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

18.

Sylvio Canuto. Spectroscopy of Atoms and Molecules in Liquid Environment. 2013. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

19.

Sylvio Canuto. Espectroscopia e Reatividade de Moléculas em Meio Líquido. 2013. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

20.

Jaramillo P. ; **COUTINHO, K.** ; CABRAL, B. J. C. ; **Sylvio Canuto** . Solvent Effects on the Absorption Spectrum of chlorophyll c. A sequential QM/MM study.. 2012. (Apresentação de Trabalho/Congresso).

21.

Sylvio Canuto. Simulação Computacional de Absorção de Luz Visível por Pigmentos Fotossintéticos. 2012. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

22.

Sylvio Canuto. Efeitos de Solvente em propriedades Espectroscópicas e Reatividade de Moléculas. 2012. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

23.

Sylvio Canuto. Solvents in Molecular Properties and Spectroscopy. Passive and Active Roles. 2012. (Apresentação de Trabalho/Congresso).

24.

Sylvio Canuto. Pigmentos Fotossintéticos. 2012. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

25.

Sylvio Canuto. O processo de submissão, editoração e revisão por pares na divulgação do conhecimento científico.. 2012. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

26.

Sylvio Canuto. Estudo teórico da absorção de luz visível por pigmentos fotossintéticos.. 2012. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

27.

Sylvio Canuto. Solvent Effects on Molecular Absorption Spectroscopy. Light Harvest by chlorophylls. 2012. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

28.

Sylvio Canuto. Absorção de Luz por Moléculas e Pigmentos Fotossintéticos. 2012. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

29.

S. Canuto. EXPLICIT SOLVENT EFFECTS ON THE VISIBLE ABSORPTION SPECTRUM OF CHLOROPHYLL C AND PHOTOSYNTHETIC PIGMENTS. 2011. (Apresentação de Trabalho/Congresso).

30.

Jaramillo P. ; **COUTINHO, K.** ; **Sylvio Canuto** . The absorption spectrum of chlorophyll c in methanol. A sequential QM/MM study.. 2011. (Apresentação de Trabalho/Congresso).

31.

Sylvio Canuto. Descrição Quântica da Natureza. 2011. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

32.

Sylvio Canuto. Simulação Computacional de Líquidos e Efeitos de Solvente em Propriedades Espectroscopia e Reatividade de Moléculas. 2011. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

33.

Sylvio Canuto. Absorção de luz visível por pigmentos fotossintéticos. 2011. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

34.

Sylvio Canuto. Absorção de luz visível por pigmentos fotossintéticos. Simulação Computacional. 2011. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

35.

S. Canuto. Effect of the Liquid Environment in the Electronic Spectroscopy of Molecular Systems.. 2010. (Apresentação de Trabalho/Congresso).

36.

S. Canuto. Solvent Effects in Molecular Spectroscopy and Reactivity. 2010. (Apresentação de Trabalho/Congresso).

37.

Sylvio Canuto. Simulação Computacional e Métodos Híbridos Clássico-Quântico. 2010. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

38.

Sylvio Canuto. Espectroscopia Molecular: Teoria, Experimentos e Simulação Computacional. 2010. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

39.

Sylvio Canuto. Física molecular e química quântica em perspectiva: avaliação dos últimos 25 anos e análise de algumas perspectivas. 2010. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

40.

Sylvio Canuto. Aspectos Teóricos e Aplicações da Modelagem Molecular. 2010. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

41.

Sylvio Canuto. Simulação Computacional de Líquidos e Efeitos do Meio em Espectroscopia Molecular. 2010. (Apresentação de Trabalho/Congresso).

42.

Sylvio Canuto. Homenageado pela ocasião dos 60 anos e pelo pioneirismo na área: Palestra de Agradecimento. 2010. (Apresentação de Trabalho/Congresso).

43.

Sylvio Canuto. Delocalização eletrônica e efeitos na interação intermolecular de sistemas líquidos. 2010. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

44.

Sylvio Canuto. Intimidade molecular: das cores à fotossíntese. 2010. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

45.

Sylvio Canuto. Indistinguibilidade dos elétrons e efeitos na interação intermolecular de líquidos. 2010. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

46.

CANUTO, S.. Seminario Espectroscopia de Líquidos Moleculares Simulação Computacional. 2009. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

47.

CANUTO, S.. Simposio Combined and Sequential QM/MM for studying solvent Effects in Molecular spectroscopy. 2009. (Apresentação de Trabalho/Simpósio).

48.

CANUTO, S.. Seminario Propriedades Espectroscópicas de Moléculas em meio Líquido.Simulação Computacional. 2009. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

49.

CANUTO, S.. Coloquio Espectroscopia de Líquidos. Simulação Computacional. 2009. (Apresentação de Trabalho/Outra).

50.

CANUTO, S.. Palestra no Curso de Verão do Instituto de Física da USP. 2009. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

51.

CANUTO, S.. Palestra: David e Golias: Átomos e Molécula Sob o Efeito de Ambientes Líquidos, Cerimônia de outorga do Título de Professor Emérito aos Profs. José David Viana e José de Lima Accioly - Brasília -2008. 2008. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

52.

CANUTO, S.. Palestra Molecular Properties in Solution no VII Encontro Anual da Sociedade Brasileira de Pesquisa em Materiais , Guarujá, SP, 2008. 2008. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

53.

CANUTO, S.. Palestra Novos Avanços na Compreensão de Efeitos de Solventes em Espectroscopia e Reatividade Molecular no VI Workshop em Física Molecular e Espectroscopia, São José dos Campos, SP, 2008. 2008. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

54.

CANUTO, S.. Palestra Mistérios da Água na IV Semana de Física da Universidade Estadual de Santa Cruz, Bahia, 2008. 2008. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

55.

CANUTO, S.. Seminário no Instituto de Física da USP - Espectroscopia e Processos Moleculares em Ambito Líquido. 2008. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

56.

CANUTO, S.. Seminário no Instituto de Física da USP - Fenol em água: peculiaridades da ligação de hidrogênio. 2008. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

57.

CANUTO, S.. Colóquio no Quadro Negro no Instituto de Física da USP - Espectroscopia de Líquidos Moleculares. 2008. (Apresentação de Trabalho/Outra).

58.

CANUTO, S.. Aula inaugural do 1º semestre de Pós-Graduação na Universidade Federal do Amazonas. 2008. (Apresentação de Trabalho/Outra).

59.

CANUTO, S. Palestra Spectroscopy of molecules and nanosolids in solution. 2008. (Apresentação de Trabalho/Outra).

60.

CANUTO, S. Simposio: Simulação Espectroscopia. 2008. (Apresentação de Trabalho/Simpósio).

61.

CANUTO, S. Palestra Plenaria Molecular Properties in Solution. 2008. (Apresentação de Trabalho/Simpósio).

62.

CANUTO, S. Seminário na UFPA, Efeitos do Ambiente Líquido em Propriedades Espectroscópicas e Reatividade de Moléculas. 2007. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

63.

CANUTO, S. Palestra no I Encontro de Física do Centro Sul do RS, Pelotas, Abril, Estrutura Eletrônica de Líquidos Moleculares: Unindo Mecânica Quântica e Mecânica Estatística. 2007. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

64.

CANUTO, S. Palestra na UFUberlândia, Junho, Mistérios da Água. 2007. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

65.

CANUTO, S. Colóquio na IFSC/USP, São Carlos, Junho, Espectroscopia e Reatividade de Moléculas em Meio Líquido. 2007. (Apresentação de Trabalho/Outra).

66.

CANUTO, S. Seminário Espectroscopia e reatividade molecular em meio líquido. 2007. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

67.

CANUTO, S. Seminário Monte Carlo/quantum mechanics studies of solvent effects in the eletronic properties of organic molecules. 2007. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

68.

CANUTO, S.. Seminário Theoretical studies of solvent effects in electronic properties of organic molecules. 2007. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

69.

CANUTO, S.. Colóquio Água, um líquido comum e anômalo. 2007. (Apresentação de Trabalho/Outra).

70.

CANUTO, S.. Colóquio Propriedades moleculares em água supercrítica. 2007. (Apresentação de Trabalho/Outra).

71.

CANUTO, S.. Colóquio Simulação clássica-quântica de líquidos e aplicações em espectroscopia. 2007. (Apresentação de Trabalho/Outra).

72.

CANUTO, S.. Palestra Física para todos na Estação Ciências, São Paulo, Agosto, Mistérios da Água. 2006. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

73.

CANUTO, S.. Palestra Física para todos no Museu Paulista, São Paulo, Agosto, Mistérios da Água. 2006. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

74.

CANUTO, S.. Palestra Física para todos no Centro Cultural São Paulo, São Paulo, Outubro, Mistérios da Água. 2006. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

75.

CANUTO, S.. Invited Talk na 4th International Meeting on Photodynamics, Cuba, Fevereiro, Spectroscopy of Atoms and Molecules in Liquid Environment Sequential Monte Carlo Quantum Mechanics Studies - Invited Talk. 2006. (Apresentação de Trabalho/Outra).

76.

CANUTO, S.. Invited Talk na III International Conference on Hydrogen Bonding and Molecular Interactions, Ucrânia. Maio, Solute-Solvent Hydrogen Bonds and Their Influence on Molecular Properties in Explicit Liquid Environment - Invited Talk. 2006. (Apresentação de Trabalho/Outra).

77.

CANUTO, S.. Invited Talk no Workshop Mathematics in Chemistry, Portugal, Julho, Combined Monte Carlo -Quantum Mechanics Approach to Study Molecular Properties in Liquid Systems - Invited Talk. 2006. (Apresentação de Trabalho/Outra).

78.

CANUTO, S.. Invited Talk na International Conference of Computational Methods in Science and Engeneering, Grecia. Outubro, Molecular Polarization in Liquid Environment. 2006. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

79.

CANUTO, S.. Coloquio no IFUSP, Outubro, Água, Um Líquido Comum e Anômalo. 2006. (Apresentação de Trabalho/Outra).

80.

CANUTO, S.. Seminário na UFGO, Goiânia, Março, Modelagem Molecular de Sistemas Líquidos. Propriedades e Espectroscopia. 2005. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

81.

CANUTO, S.. Palestra na University of Copenhagen, Dinamarca, Fevereiro, Solvent Effects from a Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Methodology. 2005. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

82.

CANUTO, S.. Aula Inaugural - Física: a Ciência e a Profissão. 2005. (Apresentação de Trabalho/Outra).

83.

CANUTO, S.. Seminário na Universidade do Chile, Abril, Combined Classical-Quantum Modeling of Liquid Systems. Solvation and Spectroscopy. 2005. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

84.

CANUTO, S.. Seminário na Universidade de Viena, Austria, Fevereiro, Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Studies of Molecular Liquids. 2005. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

85.

CANUTO, S.. Seminário na UFSC, São Carlos, Maio, Modelagem Molecular de Sistemas Líquidos. Propriedades e Espectroscopia. 2005. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

86.

CANUTO, S. Colóquio: Modelagem de Propriedades Moleculares em Meio Líquido. 2005. (Apresentação de Trabalho/Outra).

87.

CANUTO, S. Palestra no XXXI Congresso Internacional de Químicos Teóricos de Expressão Latina, Venezuela, Outubro, Hydrogen Bond and its Influence on Molecular Properties in Explicit Liquid Environment. 2005. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

88.

CANUTO, S. Palestra na 2^o Escola Mato-Grossense de Física, Cuiabá, Outubro, Simulação Computacional de Líquidos. Um Protocolo Estatístico-Quântico. 2005. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

89.

CANUTO, S. Palestra no XXIII Encontro de Físicos do Norte e Nordeste, Maceió, Novembro, Simulação Computacional de Líquidos. Um Protocolo Estatístico-Quântico. 2005. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

90.

CANUTO, S. Colóquio: A Luz e a Identidade Molecular. 2005. (Apresentação de Trabalho/Outra).

91.

CANUTO, S. Mesa Redonda - Pensando o Futuro do Workshop em Física Molecular e Espectroscopia. 2005. (Apresentação de Trabalho/Outra).

92.

CANUTO, S. Palestra no XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, São Pedro, Novembro, Química Quântica e Modelagem Molecular em Perspectiva. 2005. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

93.

CANUTO, S. Colóquio - A Luz e a Identidade Molecular. 2005. (Apresentação de Trabalho/Outra).

94.

CANUTO, S. Palestra na Third International Meeting on Photodynamics, Havana, Fevereiro, Theoretical Studies of the

95.

CANUTO, S. Palestra na II Escola de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos, Petropolis, Abril, Forças Intermoleculares e Métodos Quânticos. 2004. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

96.

CANUTO, S. Seminário na UFC, Campinas, Agosto, Moléculas e Biomoléculas em Meio Aquoso. 2004. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

97.

CANUTO, S. Palestra no II Workshop em Física Molecular e Espectroscopi in Solution, Niteroi, Dezembro, Liquid Confinement: Molecular Properties and Spectroscopy in Solution. 2004. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

98.

CANUTO, S. Palestra no Workshop 40 anos DFT Teoria Funcional da Densidade, IFSC, São Carlos, Dezembro, DFT na Química Quântica. 2004. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

99.

CANUTO, S. Seminário na Universidade de Coimbra, Portugal, Janeiro, Contribuição das Ligações de Hidrogênio para o Equilíbrio Conformacional do Furfural em Água. 2003. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

100

.

CANUTO, S. Colóquio na UFPR, Curitiba, Junho, Simulação Computacional de Moléculas e Biomoléculas em Meio Líquido. Um Tratamento Estatístico-Quântico. 2003. (Apresentação de Trabalho/Outra).

101

.

CANUTO, S. Seminário no Sanibel Symposium, EUA, Fevereiro, Solvents as Explicit Liquids using a Sequential Monte Carlo Quantum Mechanics Methodology. 2003. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

102

.

CANUTO, S. Palestra no III Brazilian Meeting on Simulation Physics, Ouro Preto, MG, Agosto, Simulação Computacional de Líquidos.

103

.

CANUTO, S. Seminário na Universidade de Uppsala, Suécia, Outubro, Hydrogen Bonds in Explicit Aqueous Environment. 2003. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

104

.

CANUTO, S. Colóquio no III Brazilian Meeting on Simulational Physics, Ouro Preto, MG, Agosto, Monte Carlo Modeling of Molecules and Bio-Molecules in the Liquid Environment. 2003. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

105

.

CANUTO, S. Palestra no Curso de Verão, IFUSP, São Paulo, Fevereiro, Simulação Computacional de Moléculas e Biomoléculas. 2003. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

106

.

CANUTO, S. Colóquio, IFSC/USP, São Carlos, Setembro, Moléculas em Meio Líquido. 2002. (Apresentação de Trabalho/Outra).

107

.

CANUTO, S. Conferência na UFF, Niterói, Outubro, Theoretical Studies of the Spectroscopic Properties of Molecules in Solution. Solvents as Explicit Liquids. 2002. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

108

.

CANUTO, S. Colóquio na Universidade de Lisboa, Portugal, Janeiro, Estudos de Moléculas em Meio Líquido. 2002. (Apresentação de Trabalho/Outra).

109

.

CANUTO, S. Seminário na Université Henri-Poincaré, França, Março, Quantum Chemistry of Molecules in Solution. 2002. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

110

.

CANUTO, S. Conferência na Indian Association for the Cultivation of Sciences, Índia, Março, Molecules in the Liquid Environment. 2002. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

111

.

CANUTO, S. Conferência na International Conference on, Índia, Março, Monte Carlo-Quantum Mechanics Studies of Molecules in Solution. 2002. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

112

.

CANUTO, S. Conferência no XXVIII Congresso de Química Teórica de Expressão Latina, Montevideo, Setembro, Hydrogen Bonds in Explicit Liquid Environment Using a Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Methodology. 2002. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

113

.

CANUTO, S. Colóquio na UFAL, Maceio, Novembro, Ligações de Hidrogênio e Propriedades de Meio Aquoso. 2002. (Apresentação de Trabalho/Outra).

114

.

CANUTO, S. Colóquio na UFPE, Recife, Novembro, Contribuição das Ligações de Hidrogênio no Equilíbrio Conformacional do Furfural em Água. 2002. (Apresentação de Trabalho/Outra).

115

.

CANUTO, S. Conferência na UFPE, Recife, Novembro, Simulação Computacional de Moléculas em Meio Líquido. 2002. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

116

.

CANUTO, S. Seminário no IFUSP, São Paulo, Maio, Moléculas em Meio Líquido. 2002. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

117

.

CANUTO, S. Colóquio no IFUSP, São Paulo, Outubro, Simulação Computacional de Moléculas e Biomoléculas. 2002. (Apresentação de Trabalho/Outra).

118

.

CANUTO, S. Seminário na UFF, Niteroi, Novembro, Ligações de Hidrogênio e Propriedades de Meio Aquoso. 2002. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

119

.

CANUTO, S. Seminário na UFMG, Belo Horizonte, Outubro, Estrutura Eletrônica de Líquidos Moleculares: Um Tratamento Estatístico-Quântico. 2001. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

120

.

CANUTO, S. Seminário na UFRJ, Rio de Janeiro, Outubro, Estrutura Eletrônica de Líquidos Moleculares: Um Tratamento Estatístico-Quântico. 2001. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

121

.

CANUTO, S. Seminário na University of Uppsala, Suécia, Fevereiro, Theoretical Studies of Solvent Effects Using Monte Carlo/Quantum Mechanics. 2001. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

122

.

CANUTO, S. Seminário no Royal Institute of Technolpgy, Suécia. Janeiro, Solvent Effects on the Electronic Properties of Molecules Using a QM/MM Monte Carlo Approach. 2001. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

123

.

CANUTO, S. Palestra no Simpósio Comemorativo no IFUSP, São Paulo, Dezembro, Física Atômica e Molecular. 2000. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

124

.

CANUTO, S. Seminário na UFPE, Recife, Maio, Estudos de Efeitos de Solventes em Propriedades Moleculares Usando Métodos Híbridos Monte Carlo/Mecânica Quântica. 2000. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

125

.

CANUTO, S. Seminario na UFPB, Paraiba, Setembro, Estrutura Eletrônica de Líquidos Moleculares. 2000. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

126

.

CANUTO, S. Palestra no Symposium in Honor of M.C. Zerner, Florida, Novembro, Studies of Solvent Effects Using Monte Carlo/Quantum Mechanics. 2000. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

127

.

CANUTO, S. Seminário na UEC, Campinas ,Dezembro, Propriedades Espectroscópicas de Líquidos. 2000. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

128

.

CANUTO, S. Seminário no Inst. de Química da UNICAMP. 1999. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

129

.

CANUTO, S. Seminário no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), Fevereiro. 1999. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

130

.

CANUTO, S. Aula inaugural (graduação) Instituto de Física da USP, Fevereiro. 1999. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

131

.

CANUTO, S. Conferência X Simpósio Brasileiro de Química Teórica, Caxambu, Novembro. 1999. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

132

.

CANUTO, S. Seminario no Instituto de Física da Universidade de Brasília, Junho. 1999. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

133

.

CANUTO, S. Seminário no Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia, Março. 1999. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

134

.

CANUTO, S.. Seminário no Inst. de Física da UNICAMP. 1998. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

135

.

CANUTO, S.. Conferência XXIV Congresso Internacional de Químicos Teóricos de Expressão Latina, Puebla, México, 5Setembro. 1998. (Apresentação de Trabalho/Conferência ou palestra).

136

.

CANUTO, S.. Seminário no Instituto de Física da USP/São Carlos, Julho. 1998. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

137

.

CANUTO, S.. Seminário no Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense, Setembro. 1998. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

138

.

CANUTO, S.. Seminário no Departamento de Física da Universidade Federal do Paraná. 1998. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

139

.

CANUTO, S.. Seminário no Inst. de Física da UFF. 1997. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

140

.

CANUTO, S.. Seminário no Inst. de Física da UFBA. 1996. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

141

.

CANUTO, S.. Seminário no Depto. de Química Fundamental da UFPE. 1995. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

142

.

CANUTO, S.. Seminário no Depto. de Química da UFSCar. 1994. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

143

.

CANUTO, S. Seminário no Depto. de Física dos Materiais da USP. 1993. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

144

.

CANUTO, S. Seminário no Depto. de Física Experimental da USP. 1992. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

145

.

CANUTO, S. Seminário no IEAv. 1990. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

146

.

CANUTO, S. Seminário no Depto. de Física da UnB. 1990. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

147

.

CANUTO, S. Seminário no Depto. de Física na UFPE. 1990. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

148

.

CANUTO, S. Seminário no Inst. de Astronomia da USP. 1989. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

149

.

CANUTO, S. Seminário no Depto. de Física da UFSM. 1988. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

150

.

CANUTO, S. Seminário no Depto. de Física da UFSCar. 1987. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

151

.

CANUTO, S. Seminário no QTP, University of Florida, Gainesville, USA. 1987. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

152

.

CANUTO, S.. Seminário no Depto. de Física da UFPB. 1986.
(Apresentação de Trabalho/Seminário).

153

.

CANUTO, S.. Seminário no Depto. de Física da UFPR. 1986.
(Apresentação de Trabalho/Seminário).

154

.

CANUTO, S.. Seminário no Depto. de Química da UFMG. 1985.
(Apresentação de Trabalho/Seminário).

155

.

CANUTO, S.. Seminário no Depto. de Física da UFG. 1985.
(Apresentação de Trabalho/Seminário).

156

.

CANUTO, S.. Seminário no Depto. de Física da UFCE. 1984.
(Apresentação de Trabalho/Seminário).

157

.

CANUTO, S.. Seminário no Depto. de Física da UFAL. 1984.
(Apresentação de Trabalho/Seminário).

158

.

CANUTO, S.. Seminário no Centro de Física da Matéria Condensada,
Inst. Nacional de Investigações Científicas, Lisboa, Portugal. 1982.
(Apresentação de Trabalho/Seminário).

159

.

CANUTO, S.. Seminário no Depto. de Física da UFMG. 1981.
(Apresentação de Trabalho/Seminário).

160

.

CANUTO, S.. Seminário no Depto. de Físico-Química da UFRJ. 1981.
(Apresentação de Trabalho/Seminário).

161

.

CANUTO, S.. Seminário no Theoretische Chemie, Heidelberg Universitaet, Alemanha. 1979. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

162

.

CANUTO, S.. Seminário no CBPF. 1978. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

163

.

CANUTO, S.. Seminário no Chalmers Institut, Goethembur, Suécia. 1977. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

164

.

CANUTO, S.. Seminário Kvantkemiska Institutionen, Uppsala Universitet, Suécia. 1977. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

165

.

CANUTO, S.. Seminário no Keminski Institut, Odense Univeritet, Dinamarca. 1976. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

166

.

CANUTO, S.. Seminario Facultad de Quimiica, Universidad de la republica, Uruguai. 1976. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

167

.

CANUTO, S.. Seminário no Teoretisch Kemi, Lund Universitet, Suécia. 1975. (Apresentação de Trabalho/Seminário).

Outras produções bibliográficas

1.

S. Canuto; DUARTE, H. A. . Proceeding of the XVI Brazilian Symposium of Theoretical Chemistry. New York, 2012. (Prefácio, Pósfacio/Prefácio)>.

2.

S. Canuto; SABIN, J. . Combining Quantum Mechanics and Molecular Mechanics. Some Recent Progresses in QM/MM Methods. New York, 2010. (Prefácio, Pósfacio/Prefácio)>.

3.

S. Canuto; DEGREVE, L. . XV Brazilian Symposium of Theoretical Chemistry. New York, 2010. (Prefácio, Pósfacio/Prefácio)>.

4.

BARRETO, R C ; [Coutinho, Kaline](#) ; [Georg, Herbert C.](#) ; **CANUTO, S** . Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research: Phys. Chem. Chem. Phys. 11, 1388 2009 (Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research).

5.

Mata, Ricardo A. ; [CABRAL, B J Costa](#) ; Millot, Claude ; [COUTINHO, K.](#) ; **CANUTO, S** . Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research: J. Chem. Phys. 130, 014505 2009 (Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research).

6.

CANUTO, S. Proceedings of the XIV Brazilian Symposium of Theoretical Chemistry, 2008. (Prefácio, Pósfacio/Prefácio)>.

7.

[Georg, Herbert C.](#) ; [Coutinho, Kaline](#) ; **CANUTO, S** . Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research: J. Chem. Phys. 126, 034507 2007 (Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research).

8.

[Fonseca, Tertius L.](#) ; [Coutinho, Kaline](#) ; **CANUTO, S** . Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research: J. Chem. Phys. 126, 034508 2007 (Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research).

9.

CANUTO, S.; [GAMA, A. A. S.](#) . Proceedings of the XIII Brazilian Symposium of Theoretical Chemistry, 2006. (Prefácio, Pósfacio/Prefácio)>.

10.

CANUTO, S. Proceedings of the XII Brazilian Symposium of Theoretical Chemistry, 2005. (Prefácio, Pósfacio/Prefácio)>.

11.

LUDWIG, V. ; Coutinho, Kaline ; **CANUTO, S** . Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research: Phys. Rev. B 70, 214110 2004 (Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research).

12.

Coutinho, Kaline ; LUDWIG, V. ; **CANUTO, S** . Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research: Phys. Rev. E 69, 061902 2004 (Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research).

13.

CANUTO, S.. Water The Essential Molecule, 2004. (Prefácio, Pós-facio/ Apresentação)>.

14.

RIVELINO, R ; CHAUDHURI, P. ; **CANUTO, S** . Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research: J. Chem. Phys. 118, 105 2003 (Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research).

15.

FILETI, E. E. ; Coutinho, Kaline ; MALASPINA, T ; **CANUTO, S** . Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research: Phys. Rev. E 67, 061504 2003 (Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research).

16.

Coutinho, Kaline ; **CANUTO, S** ; ZERNER, M. C. . Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research: J. Chem. Phys. 112, 9874 2000 (Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research).

17.

Coutinho, Kaline ; **CANUTO, S** . Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research: J. Chem. Phys. 113, 9132 2000 (Artigo em destaque no Virtual Journal of Biological Physics Research).

18.

Canuto, S.. Lectures on Physics Vo. 3, 1963. (Tradução/Livro).

Produção técnica

Assessoria e consultoria

1.

CANUTO, S.; SIMAS, A. M. ; ALMEIDA, W. B. ; NASCIMENTO, M. A. C. . Membro do Comitê Científico do XV SBQT. 2009.

2.

CANUTO, S. Consultor Ad Hoc para FAPESP, CNPq, CAPES, FAPERJ. 2008.

3.

CANUTO, S. Consultor Ad Hoc para FAPESP, CNPq, CAPES, FAPERJ. 2007.

4.

CANUTO, S.. Membro do Comitê Externo de Avaliação do Programa de Iniciação Científica (Programa PIBIC do CNPq) da Universidade de Mogi das Cruzes. 2003.

5.

CANUTO, S.. Membro do Corpo Editorial do International Journal of Quantum Chemistry. 2002.

6.

CANUTO, S.. Membro do Corpo Editorial do Computer Physics Communication. 2002.

7.

CANUTO, S.. Membro do Comitê Externo de Avaliação do Programa de Iniciação Científica (Programa PIBIC do CNPq) da Universidade de Mogi das Cruzes. 2002.

8.

CANUTO, S.. Membro do Comitê de Avaliação e Acompanhamento dos cursos de Pós-graduação em Física, junto à CAPES. 2001.

9.

CANUTO, S.. Membro do Comitê de Avaliação e Acompanhamento dos cursos de Pós-graduação em Física (reunião preparatória), junto à CAPES. 2001.

10.

CANUTO, S. Membro do Comitê para Julgamento de Projetos Temáticos da FAPERJ. 2001.

11.

CANUTO, S. Membro do Comitê Externo da Seleção de candidatos ao Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC/CNPq/UMC), Universidade de Mogi das Cruzes. 2001.

12.

CANUTO, S. Membro do Comitê de Avaliação e Acompanhamento dos cursos de Pós-graduação em Física, junto à CAPES. 2000.

13.

CANUTO, S. Membro do Comitê julgador do Programa PRODOC de Fixação de Doutores no Estado da Bahia, junto à Pró-reitoria de Pesquisa da UFBA. 2000.

14.

CANUTO, S. Membro do Comitê Externo de Avaliação do Programa de Iniciação Científica (Programa PIBIC do CNPq) da Universidade de Mogi das Cruzes. 1999.

15.

CANUTO, S. Membro do Comitê de Avaliação e Acompanhamento dos cursos de Pós-graduação em Física, junto à CAPES. 1999.

16.

CANUTO, S. Membro do Comitê Externo de Avaliação do Programa de Iniciação Científica (Programa PIBIC do CNPq) da Universidade de Mogi das Cruzes. 1998.

17.

CANUTO, S. Membro do Comitê Científico do XXIV Quitel (México). 1998.

Programas de computador sem registro

1.

COUTINHO, K. ; CANUTO, S. . DICE - A Monte Carlo Program for Liquid Simulation. 1997.

Trabalhos técnicos

1.

CANUTO, S. Membro do Editorial Board, Current Physical Chemistry (revista on line). 2013.

2.

CANUTO, S. Membro do Editorial Board Advances in Physical Chemistry (revista on line). 2013.

3.

CANUTO, S. Senior Member do Editorial Board Journal of Computational Methods in Science and Engineering. 2013.

4.

CANUTO, S. Membro do Editorial Board, International Journal of Quantum Chemistry. 2013.

5.

CANUTO, S. Membro do Editorial Board, Current Physical Chemistry (revista on line). 2012.

6.

CANUTO, S. Membro do Editorial Board, International Journal of Quantum Chemistry. 2012.

7.

CANUTO, S. Membro do Editorial Board Advances in Physical Chemistry (revista on line). 2012.

8.

CANUTO, S. Senior Member do Editorial Board Journal of Computational Methods in Science and Engineering. 2012.

9.

CANUTO, S. Membro do Editorial Board, Current Physical Chemistry (revista on line). 2011.

10.

CANUTO, S. Membro do Editorial Board, International Journal of Quantum Chemistry. 2011.

11.

CANUTO, S. Membro do Editorial Board Advances in Physical Chemistry (revista on line). 2011.

12.

CANUTO, S. Senior Member do Editorial Board Journal of Computational Methods in Science and Engineering. 2011.

13.

CANUTO, S. Membro do Editorial Board, Current Physical Chemistry (revista on line). 2010.

14.

CANUTO, S. Membro do Editorial Board, International Journal of Quantum Chemistry. 2010.

15.

CANUTO, S. Membro do Editorial Board Advances in Physical Chemistry (revista on line). 2010.

16.

CANUTO, S. Senior Member do Editorial Board Journal of Computational Methods in Science and Engineering. 2010.

17.

CANUTO, S. Referee: J. Phys. Chem.; J. Chem. Phys.; Int. J. Quantum Chem.; J. Mol. Liq.; J. Mol. Struct. (THEOCHEM); Eur. Phys. J.; J. Am. Chem. Soc.; Chem. Phys. Lett.; J. Chem. Theor. Comp.; Phys. Chem. Chem. Phys.. 2009.

18.

CANUTO, S. Consultor Ad Hoc para FAPESP, CNPq, CAPES, FAPERJ. 2009.

19.

CANUTO, S. Membro do Comitê de Avaliação das propostas de Pesquisa de Espectroscopia de Ultra-Violeta no Lab.Nac. de Luz Síncroton. 2009.

20.

CANUTO, S. Membro do Editorial Board, International Journal of Quantum Chemistry. 2009.

21.

CANUTO, S. Membro do Editorial Board Advances in Physical Chemistry (revista on line). 2009.

22.

CANUTO, S. Referee: J. Phys. Chem.; J. Chem. Phys.; Int. J. Quantum Chem.; J. Mol. Liq.; J. Mol. Struct. (THEOCHEM); Eur. Phys. J.; J. Am. Chem. Soc.; Chem. Phys. Lett.; J. Chem. Theor. Comp.; Phys. Chem. Chem. Phys.; Phys. Rev.; Theor. Chem. Acc.. 2008.

23.

CANUTO, S. Membro do Comitê de Avaliação de Proposta do Edital de Apoio a Grupos Emergentes de Pesquisa - Rio de Janeiro, no 15 a 18 de junho. 2008.

24.

CANUTO, S. Referee: J. Phys. Chem.; J. Chem. Phys.; Int. J. Quantum Chem.; J. Mol. Liq.; J. Mol. Struct. (THEOCHEM); Eur. Phys. J.; J. Am. Chem. Soc.; Chem. Phys. Lett.; J. Chem. Theor. Comp.; Phys. Chem. Chem. Phys. 2007.

25.

CANUTO, S.. Membro do Comitê Científico do XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, realizado em São Lourenço, MG, Brasil, no período de 09 a 13 de maio de 2006.. 2006.

26.

CANUTO, S.. Referee: Physical Review Letters. 2006.

27.

CANUTO, S.. Consultor Ad Hoc para a FAPESP. 2003.

28.

CANUTO, S.. Consultor Ad Hoc para o CNPq. 2003.

29.

CANUTO, S.. Referee: Brazilian Journal of Physics. 2003.

30.

CANUTO, S.. Referee: International Journal of Quantum Chemistry. 2003.

31.

CANUTO, S.. Referee: Modern Physics Letters B. 2003.

32.

CANUTO, S.. Referee: Physical Review A. 2003.

33.

CANUTO, S.. Referee: Physical Review B. 2003.

34.

CANUTO, S.. Referee: Chemical Physics Letters. 2003.

35.

CANUTO, S.. Arbitragem de artigos na revista International Journal of Quantum Chemistry. 2003.

36.

CANUTO, S.. Consultor Ad hoc para o CNPq. 2002.

37.

CANUTO, S.. Consultor Ad hoc para a FAPESP. 2002.

38.

CANUTO, S.. Consultor Ad hoc para o Conicyt (Uruguai). 2002.

39.

CANUTO, S.. Referee: Modern Physics Letters B. 2002.

40.

CANUTO, S.. Referee: Physical Review B. 2002.

41.

CANUTO, S. Referee: Physical Review A. 2002.

42.

CANUTO, S. Referee: International Journal of Quantum Chemistry. 2002.

43.

CANUTO, S. Referee: Brazilian Journal of Physics. 2002.

44.

CANUTO, S. Referee: Computer Physics Communications. 2001.

45.

CANUTO, S. Referee: International Journal of Quantum Chemistry. 2001.

46.

CANUTO, S. Referee: (THEOCHEM) Journal of Molecular Structure. 2001.

47.

CANUTO, S. Referee: Physics Letters A. 2001.

48.

CANUTO, S. Referee: Química Nova. 2001.

49.

CANUTO, S. Referee: Revista Brasileira de Física. 2001.

50.

CANUTO, S. Referee: Brazilian Journal of Physics. 2001.

51.

CANUTO, S. Referee: Journal of the Brazilian Chemical Society. 2001.

52.

CANUTO, S. Referee: Ciência e Cultura. 2001.

53.

CANUTO, S. Referee: Modern Physics Letters B. 2001.

54.

CANUTO, S. Referee: Physical Review A. 2001.

55.

CANUTO, S. Referee: Physical Review B. 2001.

56.

CANUTO, S. Referee: Asian Journal of Physics. 2001.

57.

CANUTO, S. Referee: Journal of the Chemical Society (Perkin Transactions). 2001.

58.

CANUTO, S. Consultor Ad hoc para o CNPq. 2001.

59.

CANUTO, S. Consultor Ad hoc para a CAPES. 2001.

60.

CANUTO, S. Consultor Ad hoc para a FAPESP. 2001.

61.

CANUTO, S. Consultor Ad hoc para a FAPEMIG. 2001.

62.

CANUTO, S. Consultor Ad hoc para a FAPDF. 2001.

63.

CANUTO, S. Consultor Ad hoc para a FINEP. 2001.

64.

CANUTO, S. Consultor Ad hoc para o Conicyt (Uruguai). 2001.

Demais tipos de produção técnica

1.

CANUTO, S; DEGREVE, L. . Editor da edição especial do International Journal of Quantum Chemistry (junto com Léo Degréve), XV BRASILIAN SYMPOSIUM OF THEORETICAL CHEMISTRY. 2010. (Editoração/Anais).

2.

CANUTO, S. Editor da edição especial do Advances in Quantum Chemistry (book series), COMBINING QUANTUM MECHANICS AND MOLECULAR MECHANICS, SOME RECENT PROGRESSES IN QM/MM METHODS. 2010. (Editoração/Livro).

3.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof.Benedito José Costa Cabral - Portugal. 2009. (Colaboração Científica no Exterior).

4.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof.Benedito José Costa Cabral - Portugal. 2008. (Colaboração Científica no Exterior).

5.

Canut, Sylvio. Colaboração Científica no Exterior com Prof. Marcos Caroli - Chile. 2008. (Colaboração Científica no Exterior).

6.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof.Benedito José Costa Cabral - Portugal. 2007. (Colaboração Científica no Exterior).

7.

CANUTO, S. Mini-Curso na UFBA, Salvador, Janeiro, Forças Intermoleculares e Processos em Solução. 2006. (Curso de curta duração ministrado/Outra).

8.

CANUTO, S.. Colaboração Científica no Exterior com Prof. Benedito José Costa Cabral - Portugal. 2006. (Colaboração Científica no Exterior).

9.

CANUTO, S.. Colaboração Científica no País com Prof. Roberto Rivelino de Melo Moreno - UFBA. 2006. (Colaboração Científica no País).

10.

CANUTO, S.. Colaboração Científica no Exterior com Prof. Patrício Fuentealba - Chile. 2005. (Colaboração Científica no Exterior).

11.

CANUTO, S.. Colaboração Científica no País com Prof. Marco Antônio de Castro - UFG. 2005. (Colaboração Científica no País).

12.

CANUTO, S.. Colaboração Científica no Exterior com Prof. Benedito Costa Cabral - Portugal. 2004. (Colaboração Científica no Exterior).

13.

CANUTO, S.. Colaboração Científica no País com Prof. Jordan del Nero - UFPA. 2004. (Colaboração Científica no País).

14.

CANUTO, S.. Simulação Computacional de Moléculas e Biomoléculas. 2003. (Curso de curta duração ministrado/Outra).

15.

CANUTO, S.. Colaboração Científica no Exterior com Prof. Sten Lunell - Suécia. 2003. (Colaboração Científica no Exterior).

16.

CANUTO, S.. Colaboração Científica no Exterior Prof. Yngve Ohrn - USA. 2003. (Colaboração Científica no Exterior).

17.

CANUTO, S.. Colaboração Científica no Exterior com Prof. Benedito J. Costa Cabral - Portugal. 2003. (Colaboração Científica no Exterior).

18.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof. Benedito J.Costa Cabral - Portugal. 2002. (Colaboração Científica no Exterior).

19.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof. Florian Muller-Plathe - Alemanha. 2001. (Colaboração Científica no Exterior).

20.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof. Geerd H.F.Diercksen - Alemanha. 2001. (Colaboração Científica no Exterior).

21.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof. Hans Agren - Suécia. 2001. (Colaboração Científica no Exterior).

22.

CANUTO, S. Colaboração Científica no exterior com Prof. Osvaldo Goscinski - Suécia. 2001. (Colaboração Científica no Exterior).

23.

CANUTO, S.; COUTINHO, K. . Estructura Electrónica de Moléculas y Clusters. 2000. (Curso de curta duração ministrado/Especialização).

24.

CANUTO, S. Simulação de Monte Carlo de Líquidos Moleculares. 2000. (Curso de curta duração ministrado/Especialização).

25.

CANUTO, S. Simulação de Monte Carlo. 2000. (Curso de curta duração ministrado/Especialização).

26.

CANUTO, S. Curso na VI Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, Goiania, Julho, Teoria de Perturbações de Muitos Corpor. 2000. (Curso de curta duração ministrado/Outra).

27.

CANUTO, S. Brazilian Journal of Physics (Associated Editor). 2000. (Editoração/Periódico).

28.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof. M.C.Zerner - USA. 2000. (Colaboração Científica no Exterior).

29.

CANUTO, S.; COUTINHO, K. . Química Teórica - Propriedades de Líquidos (40 horas) no Instituto de Investigaciones Químicas/Universidad Mayor de San Andrés/La Paz, Bolívia de 23 a 29/10. 1999. (Curso de curta duração ministrado/Especialização).

30.

CANUTO, S. Brazilian Journal of Physics (Associated Editor). 1999. (Editoração/Periódico).

31.

CANUTO, S.; SMEYERS, Y. G. . THEOCHEM-Journal of Molecular Structure, vol. 464, Nos. 1-3. 1999. (Editoração/Periódico).

32.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof. Florian Mülle-Plathe - Alemanha. 1998. (Colaboração Científica no Exterior).

33.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof. M.C.Zerner - USA. 1998. (Colaboração Científica no Exterior).

34.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof. M.C.Zerner - USA. 1997. (Colaboração Científica no Exterior).

35.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof. M.C. Zerner - USA. 1996. (Colaboração Científica no Exterior).

36.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof.M.C.Zerner - USA. 1995. (Colaboração Científica no Exterior).

37.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof. G.H.F.Diercksen - Alemanha. 1991. (Colaboração Científica no Exterior).

38.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof. Oscar Ventura - Uruguai. 1991. (Colaboração Científica no Exterior).

39.

CANUTO, S. Computer Physics Communications (Specialist Editor - Molecular Physics). 1990. (Editoração/Periódico).

40.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof. Benedito J.C.Cabral - Portugal. 1990. (Colaboração Científica no Exterior).

41.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof. F.Mulle-Plathe - Inglaterra. 1990. (Colaboração Científica no Exterior).

42.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof. G.H.F.Diercksen - Alemanha. 1990. (Colaboração Científica no Exterior).

43.

CANUTO, S. Computer Physics Communications (Specialist Editor - Molecular Physics). 1989. (Editoração/Periódico).

44.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof. M.C.Zerner - USA. 1989. (Colaboração Científica no Exterior).

45.

CANUTO, S. Computer Physics Communications (Specialist Editor - Molecular Physics). 1988. (Editoração/Periódico).

46.

CANUTO, S. Computer Physics Communications (Specialist Editor - Molecular Physics). 1987. (Editoração/Periódico).

47.

CANUTO, S. Colaboração Científica no Exterior com Prof. G.H.F.Diercksen - Alemanha. 1987. (Colaboração Científica no Exterior).

48.

CANUTO, S.. Colaboração Científica no Exterior com Prof J.Oddershede - Dinamarca. 1987. (Colaboração Científica no Exterior).

49.

CANUTO, S.. Colaboração Científica no Exterior com Prof. L.S.Cederbaum - Alemanha. 1987. (Colaboração Científica no Exterior).

50.

CANUTO, S.. Colaboração Científica no Exterior com Prof. O.Goscinski - Suécia. 1987. (Colaboração Científica no Exterior).

51.

CANUTO, S.. Computer Physics Communications (Specialist Editor - Molecular Physics). 1986. (Editoração/Periódico).

52.

CANUTO, S.. Colaboração Científica no Exterior com Prof. G.H.F. Diercksen - Alemanha. 1986. (Colaboração Científica no Exterior).

53.

CANUTO, S.. Colaboração Científica no Exterior com Prof. O.Goscinski - Suécia. 1986. (Colaboração Científica no Exterior).

54.

CANUTO, S.. Colaboração Científica no Exterior com Prof. M.C.Zerner - USA. 1983. (Colaboração Científica no Exterior).

55.

CANUTO, S.. Colaboração Científica no Exterior com Prof. M.C.Zerner - Canada. 1982. (Colaboração Científica no Exterior).

56.

CANUTO, S.. Colaboração Científica no Exterior com Dr. J.Muller - Noruega. 1979. (Colaboração Científica no Exterior).

57.

CANUTO, S.. Colaboração Científica no Exterior com Prof. O.Goscinski - Suécia. 1979. (Colaboração no Científica no Exterior).

Participação em bancas de trabalhos de conclusão

Mestrado

1.

CANUTO, S. Participação em banca de George Barbosa Araujo. Estudo Teórico das Propriedades Óticas e Magnéticas de Derivados e Intermediários da Reação de Oxidação do Triptofano. 2013. Dissertação (Mestrado em FÍSICA) - Instituto de Física da USP.

2.

SILVA, A. J. R.; FREIRE JR., FERANDO LAZARO; **CANUTO, S.** Participação em banca de Amaury de Melo Souza. Simulação de Sensores de Gás Nanoscópicos Baseados em Nanotubos de Carbono: Estrutura Eletrônica e Transporte de Elétons. 2011. Dissertação (Mestrado em FÍSICA) - Instituto de Física da USP.

3.

CANUTO, S.; ASSALI, L. V. C.; CHAUDHURI, P. Participação em banca de Carlos Eduardo Bistafa da Silva. Efeito de Solvente no Espectro de Absorção da 5-Fluorouracil. Análise de Diferentes Procedimentos Teóricos. 2011. Dissertação (Mestrado em FÍSICA) - Instituto de Física da USP.

4.

CANUTO, S.; VARELLA, M. T. do N.; FREITAS, L. C. G.. Participação em banca de Fernando da Silva. Estudo teórico de propriedades eletrônicas e da solvatação de carbonatos orgânicos em meio aquoso. 2011. Dissertação (Mestrado em FÍSICA) - Instituto de Física da USP.

5.

RAMOS, M. N.; SEABRA, G.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Victor de Holanda Rusu. Estudo Comparativo dos Modelos CCFOM e CCFDF na Interpretação de Intensidades Vibracionais. 2010. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal de Pernambuco.

6.

CANUTO, S. Participação em banca de Lucas Modesto da Costa. Espectroscopia de Átomos Alcalinos em Hélio Líquido. 2010. Dissertação (Mestrado em FÍSICA) - Instituto de Física da USP.

7.

CANUTO, S. Participação em banca de Renaldo Tenório de moura Juniorr. O Plásmon da Região de Recobrimento da Igação Quimica

8.

CANUTO, S. Participação em banca de Rodrigo do Monte Gester. Investigação da Dinâmica Seqüencial Monte Carlo/Mecânica Quântica para Sistemas Moleculares Orgânicos. 2007. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Pará.

9.

CANUTO, S. Participação em banca de Rafael Carvalho Barreto. Propriedades Eletrônicas de Líquidos Homogêneos. 2006. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo.

10.

CANUTO, S. Participação em banca de Sheila Cristina dos Santos Costa. Métodos Teóricos na Investigação da Estrutura Eletrônica do Resveratrol e Derivados. 2004. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Pará.

11.

TRZESNIAK, D.; **CANUTO, S.**; CHACHAN, H.; CUSTÓDIO, R.. Participação em banca de Daniel Rodrigo Ferreira Trzesniak. Modelagem Quântica de Inibidores Enzimáticos. 2002. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo.

12.

FILETI, T. M.; **CANUTO, S.**; BOHOMOLETZ, V. H.; **CASTRO, M. A.** Participação em banca de Thaciana Valentina Malaspina Fileti. Estudo Clássico-Quântico de Ligações de Hidrogênio em Meio Líquido: Piridina em Solução Aquosa. 2002. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo.

13.

CANUTO, S. Participação em banca de Paulo Henrique Ribeiro Peixoto. Estrutura Eletrônica e Polarizabilidades de Betainas. 2002. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco.

14.

CANUTO, S. Participação em banca de Ivam Pereira Mendes Neto. Estudos de Mudanças Conformacionais de Moléculas Flexíveis em Meio Solvente: Implementação em Simulação Monte Carlo e Aplicações. 2002. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo.

15.

LUDWIG, V.; **CANUTO, S.**; **ROCHA, W R**; **BORIN, A. C.** Participação em banca de Valdemir Ludwig. Estudo Teórico das Propriedades

16.

RISSI, E.; **CANUTO, S.**; CUSTÓDIO, R.. Participação em banca de Eduardo Rissi. Propriedades Estruturais e Espectroscópicas de Fosfinas, Nitrilas e suas Ligações de Hidrogênio com Água. 2000. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo.

17.

ALVES, V. M.; **CANUTO, S.**; ANDREOLI, E.. Participação em banca de Viviane Moraes Alves. Propriedades Eletro-Ópticas de Cristais Líquidos e Cristais. 1999. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo.

18.

MUNIZ, S. R.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Sérgio Ricardo Muniz. Estudo de Blindagem óptica em Colisões Frias. 1998. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo.

19.

BATISTA, H. J.; **CANUTO, S.**; SÁ, G. F. Participação em banca de Hécio José Batista. Previsão Teórica de Estrutura e Espectro de Absorção Eletrônica dos Complexos de Európio $\text{Eu}(\text{btfa})_3\text{bipy}$ e $\text{Eu}(\text{bzac})_3\text{bipy}$. 1996. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal de Pernambuco.

20.

MOURA, G. L. C.; **CANUTO, S.**; SIMAS, A. M.. Participação em banca de Gustavo Laureano Coêlho de Moura. Anéis Meso-iônicos como Eficientes Pontes Assimétricas em Moléculas para óptica Não-Linear. 1996. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal de Pernambuco.

21.

PAIVA, G.; **CANUTO, S.**; FAZZIO, A.. Participação em banca de Gilberto Paiva. Estudos Teóricos de semicondutores. 1996. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo.

22.

SILVA, L. B.; **CANUTO, S.**; FREITAS, L. C. G.. Participação em banca de Luciene Borges Silva. Simulação Monte Carlo de Solvatação Iônica. 1995. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Estadual de Campinas.

23.

TAVEIRA, A. M. A.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Ana Márcia Alves Taveira. Estudo Teórico das Transições Vibrônicas $X\ 1\text{Sg}^+$ ($v=0$) -

C 1Pu ($v=0,1,2$ e 3) em H₂ por Impacto de Elétrons. 1995. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de São Carlos.

24.

CASAGRANDE, D.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Douglas Casagrande. Estabilidade e Estrutura Eletrônica em Super-Redes (III-V)_n/(IV₂)_n. 1994. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo.

25.

POLITI, J. R. S.; **CANUTO, S.** Participação em banca de José Roberto dos Santos Politi. Estudo Teórico de Propriedades Termodinâmicas e Estruturais de Líquidos e Soluções Diluídas. 1994. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal de São Carlos.

26.

BASTOS, T. C.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Tarcis Cordeiro Bastos. Estudo Comparativo de Cadeias de Difenilbenzina e Polianilina. 1994. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo.

27.

SILVA, C. O.; **CANUTO, S.**; NASCIMENTO, M. A. C.. Participação em banca de Clarissa Oliveira da Silva. Estudo de Alguns Estados Eletrônicos de Mais Baixa Energia da Molécula de MgC. 1994. Dissertação (Mestrado em Físico-Química) - Universidade Federal do Rio de Janeiro.

28.

VENEZUELA, P. P. M.; **CANUTO, S.**; FAZZIO, A.. Participação em banca de Pedro Paulo M. Venezuela. Defeitos de Anti-Sítio e Tipo Anti-Sítio em GaP. 1993. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo.

29.

COUCEIRO, I. B.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Iakyra B. Couceiro. Pré-ionização de Lasers Gasosos por Radiações Nucleares. 1993. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal Fluminense.

30.

LONGO, K. M.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Karla Maria Longo. Estudo sobre a Estabilidade do Anion Molecular BeF₂⁻. 1991. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco.

31.

MACEDO, A. M. S.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Antônio Murilo Santos Macedo. Correlação Eletrônica e Ordem Magnética em

32.

ARAUJO, M. T.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Maria Tereza de Araujo. Conjugação de Fase por Mistura de Quatro Ondas Não Degeneradas em Vapor de Sódio. 1989. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco.

33.

CASTRO, M. A.; CANUTO, S. Participação em banca de Marcos A. de Castro. Estudo Teórico da Estrutura do CO₃. 1989. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco.

34.

LIMA, E. G.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Eneida Guerra de Lima. Estudo Completo até Quarta Ordem em MBPT para o Estado Fundamental do SiS e suas Formas Protonadas. 1987. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco.

35.

DANTAS, L. B.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Lafaete Bezerra Dantas. Ionização e Excitações de Elétrons em Camadas Profundas no SiF e no SiF₂. 1986. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco.

36.

CAMPOS FILHO, P. S.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Pedro S. Campos Filho. Estudos Teóricos de Excitações Eletrônicas em Moléculas. 1986. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco.

37.

SILVA, J. R.; **CANUTO, S.** Participação em banca de José Reinaldo Silva. O Método da Fatorização Aplicado a Problemas - Modelo de Estados Metaestáveis no Hidrogênio. 1985. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco.

38.

CHACON, M. R.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Monique R. Chacon. Excitação Vibracional por Fotoionização de Elétrons em Camadas Profundas. 1985. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco.

39.

CÉSAR, A.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Amary César. Estudo Teórico de Transições Eletrônicas em Moléculas Envolvendo Elétrons em Camadas Profundas. 1984. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal de Minas Gerais.

40.

TABOSA, J. W. R.; **CANUTO, S.** Participação em banca de José Wellington Rocha Tabosa. Espectroscopia de Saturação em CH₃OH e CO₂. 1984. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco.

41.

CASTRO, A. F.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Antonio Freitas Castro. Estrutura Eletrônica. 1982. Dissertação (Mestrado em Física) - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas.

42.

DIAS, N. L.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Nildo Loyola Dias. Estudo da Estabilidade dos Orbitais Naturais de Transição. 1982. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Ceará.

43.

ABURACHID, M. E. G.; **CANUTO, S.**; ALVES, J. L.. Participação em banca de Maria Elizabeth G. Aburachid. Estrutura Eletrônica de Absorção Ótica de Ions de Metais de Transição Pesado como Impureza em Cristais de KCl e NaCl. 1980. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Minas Gerais.

Teses de doutorado

1.

CANUTO, S. Participação em banca de Daniel de Castro Araujo Valente. Mecanismos de relaxação não-radiativa do silol. 2022. Tese (Doutorado em Química) - Universidade Federal do Rio de Janeiro.

2.

CANUTO, S. Participação em banca de Lucas Modesta da Costa. Um Tratamento Multiescala (QM/MM) das Propriedades Espectroscópicas de Tetraciclina e seus Complexos com Mg e Eu em Água. 2014. Tese (Doutorado em física) - Instituto de Física da USP.

3.

MORENO, R. R. M.; DALPIAN, G.; **CANUTO, S.**; VIANNA, José David M. Participação em banca de Maria Isabel Almeida de Oliveira. Absorção Ótica de Nanoestruturas Baseadas em Silício. 2014. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal da Bahia.

4.

CALDAS, M. J.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Jose Maximilian F Pinheiro Junior. Propriedades Eletrônicas de Sistemas Conjugados: a importância da troca exata. 2014. Tese (Doutorado em física) - Instituto de Física da USP.

5.

VALLET, V.; REAL, F.; SPEZIA, R.; **CANUTO, S.**; Roncero O; AVOUARD, F. Participação em banca de Yansel Omar Guerrero Martinez. Developments of many-body force-field models for ion solvation properties. 2013. Tese (Doutorado em Physique) - Univesité Lille 1.

6.

CANUTO, S. Participação em banca de Marcelo Hidalgo Cardenuto. Propriedades Eletrônicas de Átomos e Moléculas em Fluidos Supercríticos,. 2013. Tese (Doutorado em física) - Instituto de Física da USP.

7.

CANUTO, S. Participação em banca de Yoelvis Orozco González. Fotofísica e Propriedades Dinâmicas de Sistemas Moleculares. 2012. Tese (Doutorado em física) - Instituto de Física da USP.

8.

CANUTO, S. Participação em banca de Rodrigo do Monte Gester. Propriedades Eletrônicas e Magnéticas de Moléculas Solvatadas. 2012. Tese (Doutorado em física) - Instituto de Física da USP.

9.

BARBOSA, M. C.; FIGUEIREDO, W.; LEVIN, Y.; REGO, R. B. C.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Márcia Martins Szortyka. Estudo das Propriedades Dinâmicas e Termodinâmicas em Sistemas Tipo Água. 2010. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

10.

LALIC, S. S.; MENESES, C. T.; DUQUE, J. G. S.; OLIVEIRA, P. D. S. C.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Tatiana Santos de Araujo Batista. Desenvolvimento de Nanomateriais Absorvedores no Ultravioleta para Aplicações em Filtros Solares. 2010. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de Sergipe.

11.

FAZZIO, A.; MUNIZ, R. B.; LATGE, A.; COUTINHO-NETO, M. D.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Matheus Paes Lima. Desenvolvimentos nas Aplicações da DFT em Materiais Nanoestruturados. 2010. Tese (Doutorado em física) - Instituto de Física da USP.

12.

CANUTO, S.; SILVA, J. B. P.; VARELLA, M. T. do N.; SALINAS, S. R. A.; FAZZIO, Adalberto. Participação em banca de Rafael Carvalho Barreto. Simulação de Propriedades Estruturais e Eletrônicas de Agregados, Líquidos Regulares e Supercríticos. 2010. Tese (Doutorado em física) - Instituto de Física da USP.

13.

CANUTO, S.; FREIRE, V. N.; MORENO, R. R. M.; COUTINHO, Kaline; MOURA, F. A. B. F. Participação em banca de Vinicius Manzoni Vieira. Estudo das Propriedades Espectroscópicas de Moléculas Orgânicas em Solução Utilizando a Combinação do Modelo Contínuo PCM e do Método Sequencial QM/MM. 2010. Tese (Doutorado em Física da Matéria Condensada) - Universidade Federal de Alagoas.

14.

CANUTO, S.. Participação em banca de Rafael Carvalho Barreto. Simulação de Propriedades Estruturais e Eletrônicas de Agregados, Líquidos Regulares e Supercríticos. 2010. Tese (Doutorado em física) - Instituto de Física da USP.

15.

CANUTO, S.. Participação em banca de Luciana Guimarães. Ciências Químicas. 2009. Tese (Doutorado em Química) - Universidade Federal de Minas Gerais.

16.

CANUTO, S.. Participação em banca de Márcia Martins Szortyka. Propriedades Dinâmicas e Termodinâmicas em Sistemas vitros. 2009. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

17.

CANUTO, S.. Participação em banca de Mauro Ribeiro Junior. Cálculos de Estrutura Eletrônica e de Transporte em Nanoestruturas com Inclusão de Autoenergia. 2009. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

18.

CANUTO, S.. Participação em banca de Edwin Hobi Junior. Estudo teórico da evolução dinâmicas de nanofios de ouro puros e com impurezas. 2009. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

19.

CANUTO, S.. Participação em banca de Hugo Ricardo Reis Santos. Estudos Teóricos na Superfície (1,0,0) de Silício. 2009 - Universidade do Porto.

20.

CANUTO, S.. Participação em banca de Alan Barros de Oliveira. Anomalias termodinâmicas, dinâmica e estruturais em modelos contínuos de duas escalas para a água. 2008. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

21.

CANUTO, S.. Participação em banca de Bruno Araújo Cautiero Horta. Estudo por dinâmica molecular do fator de crescimento vascular endotelial (VEGF). 2008. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal do Rio de Janeiro.

22.

CANUTO, S.. Participação em banca de Contia Crstina De Vequi Suplicy. Características estruturais e espectroscópicas das sondas fluorescentes PRODAN e LAURDAN. Um estudo experimental e teórico. 2008. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

23.

CANUTO, S.. Participação em banca de Gustavo Henrique Brancaloni. Estudos, por Simulação Molecular, das Propriedades Estruturais, Dinâmicas e Relações com a Atividade do Fator de Crescimento de Fibroblastos Básico e Mutantes, nos Meios Aquoso e Etanólico. 2007. Tese (Doutorado em Química) - USP/Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de R.

24.

CANUTO, S.. Participação em banca de José Guilherme da Silva Lopes. Espectroscopia Vibracional e Eletrônica de Diaminoantraquinonas como Sondas de Microambientes. 2007. Tese (Doutorado em Química) - Universidade de São Paulo.

25.

CANUTO, S.. Participação em banca de Marina Pelegrini. Estudo Teórico da Estrutura Molecular, da Espectroscopia Vibracional e da Reatividade de Hidrazinas e Aminas. 2007. Tese (Doutorado em Química) - Instituto Tecnológico de Aeronáutica.

26.

CANUTO, S.. Participação em banca de Freddy Fernandes Guimarães. Modelagem e Análise Teórica das Espectroscopias de Fotoabsorção, Fotoionização e Pump-Probe Resolvida no Tempo. 2007. Tese (Doutorado em Química) - Universidade Federal de Minas Gerais.

27.

CANUTO, S.. Participação em banca de Frederico Dutilh Novaes. Nanoestruturas: Propriedades Estruturais, Eletrônicas e de Transporte de Carga. 2006. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

28.

CANUTO, S. Participação em banca de Francisco Alberto Fernández Lima. Dessorção Induzida por Laser em Insulina, Carbono e Haletos Alcalinos. 2006. Tese (Doutorado em Física) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

29.

CANUTO, S. Participação em banca de Renato Luis Tâme Parreira. As Ligações de Hidrogênio e o Efeito do Substituinte - Influência na Ressonância e Aromaticidade de Cátions e Ácidos Orgânicos. 2006. Tese (Doutorado em Química) - Universidade de São Paulo.

30.

CANUTO, S. Participação em banca de Pavel Leiva. Aplicaciones de Funcionales de Orbitales Naturales para el Cálculo de Propiedades Moleculares. 2006. Tese (Doutorado em Física) - Faculdade de Ciências y Tecnologias Nucleares.

31.

CANUTO, S. Participação em banca de Thaciana Valentina Malaspina Fileti. Estabilidade Isomérica e Ligações de Hidrogênio em agregados e líquidos moleculares. 2006. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

32.

CANUTO, S.; RUUD, Kenneth; SAUER, Stefan. Participação em banca de Jacob Kongsted. Coupled Cluster Response Theory for Molecules in Condensed Phases. Theoretical Framework, Implementation Aspects and Applications. 2005. Tese (Doutorado em Chemistry) - University of Copenhagen.

33.

CANUTO, S. Participação em banca de Hannes Fischer. Estudos Estruturais de Proteínas em Solução por SAXS utilizando Luz Síncrotron. 2005. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

34.

CANUTO, S. Participação em banca de José Roberto dos Santos Politi. Inovações Teóricas e Experimentos Computacionais em Monte Carlo Quântico. 2005. Tese (Doutorado em Química) - Universidade Estadual de Campinas.

35.

CANUTO, S. Participação em banca de Roberto Ferreira dos Santos. Estudo Espectroscópico da Molécula Diatômica NaLi e dos Radicais de MgCl e MgF. 2005. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal Fluminense.

36.

CANUTO, S. Participação em banca de Wagner de Mendonça Faustino. Sobre os Processos de Transferência de Carga Ligante-Metal em Complexos de Íons Lantanídeos. 2005. Tese (Doutorado em Química) - Universidade Federal de Pernambuco.

37.

CANUTO, S. Participação em banca de Valdemir Eneias Ludwig. Estrutura Eletrônica e Interações Intermoleculares em Líquidos. 2005. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

38.

CANUTO, S. Participação em banca de Guilherme Menegon Arantes. Sobre as Proteínas Tirosina-Fosfatases. Reatividade Intrínseca de Esteres de Fosfato e Simulação Computacional dos Mecanismos de Reação Enzimática. 2004. Tese (Doutorado em Química) - Universidade de São Paulo.

39.

CANUTO, S. Participação em banca de Luiz Guilherme Machado de Macedo. Geração de Bases Gaussianas Relativísticas e Aplicações em Química Inorgânica. 2004. Tese (Doutorado em Química (Química Analítica)) - Universidade de São Paulo.

40.

CANUTO, S. Participação em banca de Eduardo Sérgio de Souza. Dinâmica Conformacional de Peptídeos: Um Estudo por Fluorescência. 2004. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

41.

CANUTO, S. Participação em banca de Eduardo Augusto Rissi. Estudo de ligações de Hidrogênio via Métodos de Química Quântica e via Teoria do Funcional da Densidade. 2004. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

42.

CANUTO, S. Participação em banca de Eudes Eterno Fileti. Moléculas em Aglomerados e em Meio Líquido. 2004. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

43.

CANUTO, S. Participação em banca de Roberto Rivelino de Melo Moreno. Efeitos de Ligações de Hidrogênio em Propriedades de Aglomerados e de Líquidos Moleculares. 2003. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

44.

CANUTO, S. Participação em banca de Cristina Porto Gonçalves. Teoria SCF-MO-LCAO dos Efeitos de Massa Nuclear Finita em Moléculas e Isotopômeros. 2003. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de Minas Gerais.

45.

CANUTO, S. Participação em banca de Sérgio Duvoisin Jr. Estudo Teórico de Sistemas Moleculares Simples (Dímeros) e Complexos (APFO/H₂O) Baseado em Cálculos de Primeiros Princípios. 2003. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de Santa Catarina.

46.

CANUTO, S. Participação em banca de Neemias Alves de Lima. Teoria do Funcional da Densidade para Sistemas Espacialmente Correlacionados. 2002. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

47.

CANUTO, S. Participação em banca de Marcelo Ferreira da Silva. Teoria do Funcional da Densidade e Magnetismo no Modelo de Hubbard. 2002. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

48.

CANUTO, S. Participação em banca de José Paulo D'Incao. Funções de Canal e Curvas de Potencial para o Atomo de Lítio pelo Método Adiabático Hiperesférico. 2002. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

49.

CANUTO, S. Participação em banca de Nara Cristina Guisoni. Polimorfismo Líquido e Efeito Hidrofóbico Através de Modelos Simplificados. 2002. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

50.

CANUTO, S. Participação em banca de David Lima Azevedo. Configurações Eficientes em Espalhamento de Elétrons ou Pósitrons por Moléculas. 2001. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Estadual de Campinas.

51.

CANUTO, S. Participação em banca de Cristiano Ruch Werneck Guimarães. Análise Termodinâmica da Inibição de Trombina por Novos Derivados de Benzamida via Perturbações de Energia Livre. 2001. Tese (Doutorado em Química) - Universidade Federal do Rio de Janeiro.

52.

CANUTO, S. Participação em banca de José André Teixeira Azevedo. Determinação Teórica da Energia de Coesão e de Parâmetros de Solubilidade de Polímeros e Solventes. 2001. Tese (Doutorado em Físico-Química) - Universidade Federal do Rio de Janeiro.

53.

AMARAL, M. S.; CANUTO, S.; ITO, A. Participação em banca de Marcos Serrou do Amaral. Estudo Teórico dos Espectros de Absorção e Fluorescência do Triptofano e Análogos. 2001. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

54.

CANUTO, S.; GAMA, A. S. Participação em banca de Ana Elizabete de Araújo Machado. Hiperpolarizabilidades Semi-Empíricas de Sistemas Orgânicos Doador-Receptor. 2001. Tese (Doutorado em Química) - Universidade Federal de Pernambuco.

55.

CANUTO, S.; LONGO, R.; FREITAS, L. C. G.; **SIMAS, A. M.;** FERREIRA, R.. Participação em banca de Marcelo Zaldini Hernandes. Os efeitos do solvente em processos químicos: novos modelos, metodologias e aplicações. 2001. Tese (Doutorado em Química) - Universidade Federal de Pernambuco.

56.

GUIMARÃES, C. R. W.; **CANUTO, S.;** ALENCASTRO, R. B.. Participação em banca de Cristiano Ruch Werneck Guimarães. Estudos de inibidores enzimáticos. 2001. Tese (Doutorado em Físico-Química) - Universidade Federal do Rio de Janeiro.

57.

CANUTO, S.; BRESCANSIN, Luiz Marco. Participação em banca de Ana Márcia Alves Taveira. Estudo do efeito do Acoplamento Multicanal no Cálculo de Seções de Choque de Excitação Eletrônica da Molécula de H₂. 2001. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Estadual de Campinas.

58.

COSTA JÚNIOR, N. B.; **CANUTO, S.;** **SIMAS, A. M.** Participação em banca de Nivam Bezerra da Costa Júnior. Desenvolvimento de Novas Técnicas para o Cálculo de Átomos, Moléculas e Compostos de Coordenação. 2000. Tese (Doutorado em Química) - Universidade Federal de Pernambuco.

59.

ROCHA, W. R.; **CANUTO, S.**; ALMEIDA, W. B.. Participação em banca de Willian Ricardo Rocha. Estudo Teórico de Compostos Organometálicos com Potencial Catalítico. 2000. Tese (Doutorado em Química) - Universidade Federal de Minas Gerais.

60.

MOTA, F. B.; **CANUTO, S.**; FAZZIO, A.. Participação em banca de Fernando Brito Mota. Propriedades Eletrônicas e Estruturais do Nitreto de Silício na Fase Amorfa. 1999. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

61.

SILVA, C. O.; **CANUTO, S.**; SILVA, E. C. D.. Participação em banca de Clarissa Oliveira Silva. Cálculos Ab Initio do pKa de Compostos Orgânicos em Solução. 1999. Tese (Doutorado em Físico-Química) - Universidade Federal do Rio de Janeiro.

62.

PICKHOLZ, M. A.; **CANUTO, S.**; SANTOS, C.. Participação em banca de Mônica Andrea Pickholz. Macromoléculas Conjugadas: Um Estudo Teórico de Propriedades de Interesse para o Desenvolvimento de Novos Materiais. 1999. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Estadual de Campinas.

63.

CHAUDHURI, P.; **CANUTO, S.**; ADHIKARI, S. K.. Participação em banca de Puspitapallab Chaudhuri. Positron-helium scattering at intermediate energies using Close-coupling approximation. 1999. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho.

64.

URAHATA, S. M.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Sergio M Urahata. Efeito Hidrofóbico: Aplicação de Modelos Clássico e Quântico no Sistema Benzeno-Água. 1999. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

65.

ANDRADE NETO, A. S.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Agostinho Serrano de Andrade Neto. Estudo Teórico de Propriedades de Moléculas Isoladas e em Meio Solvente. 1999. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

66.

SAAVEDRA FILHO, N.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Nestor Saavedra Filho. Estudo de Ligações de Hidrogênio e sua Influência nas Propriedades Ópticas e Elétricas de Moléculas Orgânicas em Meio Solvente. 1999. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

67.

SANTOS, H. F.; **CANUTO, S.**; ALMEIDA, W. B.. Participação em banca de Hélio F. dos Santos. Análise Conformacional e Espectroscópica de Moléculas do tipo enzeno-Substituído na Fase Gasosa e em Solução. 1998. Tese (Doutorado em Química) - Universidade Federal de Minas Gerais.

68.

RODRIGUES, A. S. W.; **CANUTO, S.**; OLIVEIRA NETO, M.. Participação em banca de Araken dos Santos Werneck Rodrigues. Potencial Eletrostático em Biomoléculas. 1997. Tese (Doutorado em Ciências Biológicas (Biologia Molecular)) - Universidade de Brasília.

69.

CARLOS ROBERTO MARTINS DA CUNHA,; **CANUTO, S.**; BRESCANSIN, L. M.. Participação em banca de Carlos Roberto Martins da Cunha,. Propriedades e Estrutura Eletronica de Clusters de van der Waals. 1997. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

70.

KINTOP, J. A.; **CANUTO, S.**; MACHADO, W.. Participação em banca de Jorge Alberto Kintop. Método Semi-Empírico Magnético com Aplicações em Fullerenos. 1997. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

71.

OTA, A. T.; **CANUTO, S.**; ITO, A.. Participação em banca de André T. Ota. Métodos Clássicos e Quânticos no Estudo de Geometrias de Moléculas Biológicas. 1997. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

72.

SANTOS, M. S.; **CANUTO, S.**; BAGNATO, V.. Participação em banca de Mônica Silva dos Santos. Aprisionamento Simultâneo de Sódio-Potássio e Estudos Colisionais. 1997. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

73.

CUNHA, C. R. M.; **CANUTO, S.**. Participação em banca de Carlos Roberto Martins Cunha. Forças Intermoleculares: Propriedades Estruturais e Eletrônicas de Clusters de van der Waals. 1997. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

74.

FUJIMOTO, M. M.; **CANUTO, S.**. Participação em banca de Milton Massumi Fujimoto. Aplicação do Método de Frações Contínuas para o Espalhamento de Elétrons por Moléculas Lineares, Departamento de Química UFSCar. 1996. Tese (Doutorado em Química) - Universidade Federal de São Carlos.

75.

PEDUTO, P. R.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Pascoal Roberto Peduto. RS-LMTO-ASA-2D: Cálculo de Estrutura Eletrônica em Sistemas Bidimensionais. 1995. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

76.

BOTELHO, L. F. C.; **CANUTO, S.**; FREITAS, L. C. G.. Participação em banca de Lucia de Fátima Costa Botelho. Simulação Computacional de Líquidos. 1994. Tese (Doutorado em Química) - Universidade Federal de São Carlos.

77.

BORIN, A. C.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Antonio Carlos Borin. Aplicações do Método Interação de Configurações ao Estudo de Espectroscopia Eletrônica e Ressonância Quadrupolar Nuclear. 1993. Tese (Doutorado em Química (Físico-Química)) - Universidade de São Paulo.

78.

CASTRO, M. A.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Marcos A. de Castro. Cálculos de Propriedades Elétricas de Átomos e Moléculas. 1992. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco.

79.

YAMAMOTO, J. F.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Jorge Futoshi Yamamoto. Estados Estacionários de Duas Partículas de Dirac em um Centro Coulombiano. 1991. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

80.

MOHALLEN, J. R.; **CANUTO, S.** Participação em banca de José Rachid Mohallen. Solução por Discretização Integral de Equações de Griffin-Hill-Wheller Mono Eletrônicas. 1987. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo.

81.

MALBOUISSON, L.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Luis Malbouisson. Um Estudo sobre as Múltiplas Soluções da Equação de Hartree-Fock-Roothaan para Sistemas de Camadas Fechadas. 1986. Tese (Doutorado em Física) - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas.

82.

REYES, L. M.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Luis Miguel Reyes. Semelhanças na Estrutura Eletrônica de Sistemas Poliatômicos. 1986. Tese (Doutorado em Química) - Universidade Federal de Minas Gerais.

83.

JORGE, F. E.; **CANUTO, S.** Participação em banca de Francisco Elias Jorge. Estudos de Índices de Ligação em Bases Não-Ortogonais. 1985. Tese (Doutorado em Física) - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas.

Qualificações de Doutorado

1.

CANUTO, S. Participação em banca de Sri Bhaskar Mondal. Theoretical Study of Potential Energy Surface, Reaction and Thermochemistry of Molecules of Astrophysical and Industrial Interest. 2010. Exame de qualificação (Doutorando em Physics) - Indian Association of Cultivation of Science.

Participação em bancas de comissões julgadoras

Professor titular

1.

CANUTO, S. Participação em Banca de Prof. Titular de Antonio Gomes de Souza Filho. 2021. Universidade Federal do Ceará.

2.

CANUTO, S. Participação em Banca de Prof. Titular de Antonio Carlos Fontes dos Santos. 2021. Universidade Federal do Rio de Janeiro.

3.

CANUTO, S. Concurso Publico para Professor Titular no IFUSP. 2014. Instituto de Física da USP.

4.

CANUTO, S. Banca Examinadora (Professor Titular). 2009. Universidade Federal do Rio de Janeiro.

5.

CANUTO, S. Comissão Examinadora (Professor Titular). 2009. Universidade Federal do Rio de Janeiro.

6.

CANUTO, S. Comissão Julgadora do Concurso Público para Provimento de um Cargo de Professor Titular. 2006. Universidade Federal do Rio de Janeiro.

7.

CANUTO, S.. Banca de Concurso de Ascensão ao último nível da carreira de Pesquisador. 2004. Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas.

8.

CANUTO, S.. Comissão Julgadora do Concurso de Títulos e Provas para Provimento de um Cargo de Professor Titular. 2004. Universidade de São Paulo.

9.

CANUTO, S.. Banca Examinadora do Concurso para Provimento de um Cargo de Professor Titular. 2004. Universidade Federal de Minas Gerais.

10.

CANUTO, S.. Comissão Julgadora do Concurso Público de Títulos e Provas para Provimento de Dois Cargos de Professor Titular. 2004. Universidade de São Paulo.

11.

CANUTO, S.. Banca Examinadora (Professor Titular). 2002. Universidade Estadual de Campinas.

12.

CANUTO, S.. Banca Examinadora (Professor Titular). 2000. Universidade de São Paulo.

13.

CANUTO, S.. Banca Examinadora (Professor Titular). 2000. Universidade de São Paulo.

14.

CANUTO, S.. Banca Examinadora (Professor Titular). 1998. Universidade de São Paulo.

15.

CANUTO, S.. Banca Examinadora (Professor Titular). 1997. Universidade Federal do Rio de Janeiro.

1.

KOILLER, B.; SILVEIRA, E. F.; BORGES, I.; ESTILAC, M.; **CANUTO, S.**. Professor Adjunto no IQ-UFRJ. 2010. Universidade Federal do Rio de Janeiro.

2.

CANUTO, S.. Banca de concurso público de ingresso à carreira de docente (Adjunto 1) Universidade Federal de Minas Gerais. 2009.

3.

CANUTO, S.. Comissão julgadora de concurso público para Provimento de um cargo de Professor Doutor, São Carlos. 2008. Universidade de São Paulo.

4.

CANUTO, S.. Banca de concurso público para Professor Efetivo, Maceió. 2008. Universidade Federal de Alagoas.

5.

CANUTO, S.. Comissão Julgadora do Concurso Público para Provimento de Cargos de Professor Doutor na Universidade Federal do ABC. 2006. Universidade Federal do Abc.

6.

CANUTO, S.. Comissão Julgadora do Concurso Público para Provimento de um Cargo de Professor Doutor. 2006. Universidade Federal de Itajubá.

7.

CANUTO, S.. Banca Examinadora (Professor Adjunto). 2003. Universidade Federal de Santa Catarina.

8.

CANUTO, S.. Banca Examinadora (Professor Doutor). 2003. Universidade de São Paulo.

9.

CANUTO, S.. Banca Examinadora (Professor Doutor). 2003. Universidade de São Paulo.

10.

CANUTO, S. Banca Examinadora (Professor Adjunto). 1998. Universidade Federal do Paraná.

11.

CANUTO, S. Banca Examinadora (Professor Adjunto). 1998. Universidade Federal do Paraná.

12.

CANUTO, S. Banca Examinadora (Professor Adjunto). 1998. Universidade Federal de São Carlos.

13.

CANUTO, S. Banca Examinadora (Professor Adjunto). 1997. Universidade de São Paulo.

14.

CANUTO, S. Banca Examinadora (Professor Adjunto). 1997. Universidade Federal de Goiás.

15.

CANUTO, S. Banca Examinadora (Professor Adjunto). 1995. Universidade Estadual de Campinas.

16.

CANUTO, S. Banca Examinadora (Professor Adjunto). 1994. Universidade Federal de Minas Gerais.

17.

CANUTO, S. Banca Examinadora (Professor Adjunto). 1992. Universidade Federal do Rio de Janeiro.

Livre docência

1.

CANUTO, S. Banca Examinadora (Livre-docência) da Profa. Dra. Elizabeth Mateus Yoshimura. 2003. Universidade de São Paulo.

2.

CANUTO, S. Banca Examinadora (Livre-docência) do Prof. Dr. Antônio José Roque da Silva. 2003. Universidade de São Paulo.

3.

CANUTO, S.. Banca Examinadora (Livre-docência) do Dr. Antonio Carlos Borin. 2001. Universidade de São Paulo.

4.

CANUTO, S.. Banca Examinadora (Livre-docência) da Dra. Vera H. Bohomoletz. 2001. Universidade de São Paulo.

5.

CANUTO, S.. Banca Examinadora (Livre-docência) da Dra. Rosângela Itri. 2001. Universidade de São Paulo.

6.

CANUTO, S.. Banca Examinadora (Livre-Docente). 1997. Universidade de São Paulo.

7.

CANUTO, S.. Banca Examinadora (Livre-Docente). 1996. Universidade Estadual de Campinas.

8.

CANUTO, S.. Banca Examinadora (Livre-docência) do Dr. Daniel Pereira e Dr. Marco Aurélio Pinheiro Lima. 1991. Universidade Estadual de Campinas.

Avaliação de cursos

1.

CANUTO, S.; R. Galvão. Comissão de Assessoramento da CAPES ao Programa de Pós-Graduação. 2009. Universidade Federal de Pernambuco.

2.

CANUTO, S.; C. Zilio. Comissão de Assessoramento da CAPES ao Programa de Pós-Graduação. 2009. Universidade Federal do Rio de Janeiro.

3.

CANUTO, S.. Comissão de Avaliação da FAPERJ, 24 a 27 de maio, Rio de Janeiro. 2009. Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ.

4.

CANUTO, S. Comissão de Avaliação das Propostas de Pesquisa de Espectroscopia de Ultra-Violeta. 2009. Universidade Estadual de Campinas.

5.

CANUTO, S. Comissão de Avaliação da FAPERJ, Rio de Janeiro 2008. 2008. Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ.

6.

CANUTO, S. Comissão de Assessoramento da CAPES ao Programa de Pós-Graduação. 2003. Universidade Federal do Amazonas.

7.

CANUTO, S. Comissão de Assessoramento da CAPES ao Programa de Pós-Graduação. 1999. Fundação para o Desenvolvimento da UNESP.

8.

CANUTO, S. Comissão de Assessoramento da CAPES ao Programa de Pós-Graduação. 1999. Universidade Federal do Paraná.

9.

CANUTO, S. Comissão de Assessoramento da CAPES ao Programa de Pós-Graduação. 1999. Universidade Estadual de Maringá.

Outras participações

1.

CANUTO, S. Presidente do Comitê de Busca (MCTI) para Seleção do Diretor do CBPF. 2020. Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas.

2.

CANUTO, S. Comitê de Seleção da Academia Brasileira de Ciências (2020-). 2020. Academia Brasileira de Ciências.

3.

AMATORE, C.; **CANUTO, S.** Membro do Juri Internacional para concessão dos Prêmios Unesco-L'Oréal "For Women in Science". 2014. Unesco-L'Oréal.

4.

CORBANI, A.; **CANUTO, S.**; EGUES, J. C.; BAESSO, M.; ANDRADE JUNIOR, J. S.. Concurso para Ingresso na Carreira (MS-3). 2014. Instituto de Física da USP.

5.

CANUTO, S.. Comissão de Avaliação da FAPERJ, 14 e 15 de março, Rio de Janeiro. 2013. FAPERJ.

6.

ZEWAIL, A.; **CANUTO, S.**. Membro do Juri Internacional para concessão dos Prêmios Unesco-L'Oréal "For Women in Science?". 2012. Unesco-L'Oréal.

7.

CANUTO, S.. Comissão de Avaliação da FAPERJ, 13 e 14 de agosto, Rio de Janeiro. 2012. FAPERJ.

8.

ZEWAIL, A.; **CANUTO, S.**. Membro do Juri Internacional para concessão dos Prêmios Unesco-L'Oréal "For Women in Science?". 2010. Unesco-L'Oréal.

9.

CANUTO, S.. Banca de concurso de ingresso no Departamento de Química Fundamental na Universidade Federal de Pernambuco, Recife. 2009.

10.

CANUTO, S.. Banca de concurso de ingresso à carreira - Universidade Federal de Pernambuco. 2009. Universidade Federal de Pernambuco.

11.

CANUTO, S.. Banca de concurso de ingresso no CBPF, Rio de Janeiro. 2009.

12.

CANUTO, S.. Comissão de Assessoramento da CAPES ao Programa de Pós-Graduação. 2008. Universidade Federal do Espírito Santo.

13.

CANUTO, S.. Banca de Concurso de ingresso no Instituto de Física da Universidade Federal , Niteroi. 2008.

14.

CANUTO, S.. Comissão julgadora de concurso para provimento de um cargo de Professor Doutor, São Carlos. 2008. Universidade de São Paulo.

15.

CANUTO, S.. Comissão de Assessoramento da CAPES ao Programa de Pós-Graduação. 2007. Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

16.

CANUTO, S.. Comissão de Especialistas para Julgamento dos Candidatos à Bolsa de Reconhecimento Acadêmico Zeferino Vaz. 2005. Universidade Estadual de Campinas.

17.

CANUTO, S.. Comissão Julgadora: Concessão do Prêmio Zeferino Vaz. 2004. Universidade Estadual de Campinas.

18.

CANUTO, S.. Comissão de Assessoramento da CAPES ao Programa de Pós-Graduação. 2003. Universidade Federal do Amazonas.

19.

CANUTO, S.. Comissão Julgadora: Concessão do Prêmio Zeferino Vaz. 2003. Universidade Estadual de Campinas.

20.

CANUTO, S.. Comissão Julgadora: Concessão do Prêmio Zeferino Vaz. 2002. Universidade Estadual de Campinas.

21.

CANUTO, S.. Participação no Processo de Seleção do PIBIC para o período 2001/2002. 2001. Universidade de Mogi das Cruzes.

22.

CANUTO, S.. Comissão Julgadora: Concessão do Prêmio Zeferino Vaz. 2000. Universidade Estadual de Campinas.

23.

CANUTO, S.. Programa PRODOC de Fixação de Doutores no Estado da Bahia. 2000. Universidade Federal da Bahia.

24.

CANUTO, S.. Comissão Julgadora: Concessão do Prêmio Zeferino Vaz. 1997. Universidade Estadual de Campinas.

25.

CANUTO, S.. Comissão Julgadora: Concessão do Prêmio Zeferino Vaz. 1995. Universidade Estadual de Campinas.

26.

CANUTO, S.. Prova de seleção de ingressos (Doutorado). 1992. Universidade Federal de Pernambuco.

27.

CANUTO, S.. Banca Examinadora (Progressão Adjunto) do Dr. José Augusto Suruagy Monteiro e Dra. Ana Carolina Salgado de Aguiar. 1992. Universidade Federal de Pernambuco.

28.

CANUTO, S.. Prova de seleção de ingressos (Doutorado). 1989. Universidade Federal de Pernambuco.

29.

CANUTO, S.. Prova de seleção de ingressos (Doutorado). 1984. Universidade Federal de Pernambuco.

30.

CANUTO, S.. Prova de seleção de ingressos (Doutorado). 1981. Universidade Federal de Pernambuco.

Eventos

Participação em eventos, congressos, exposições e feiras

1.

Colóquio no Inst Física da UFF.Theoretical Studies of Molecular Spectroscopy in Simple and Complex Environments. 2022. (Seminário).

2.

Palestra na UNIFESP.Desenvolvimento da Pesquisa Científica no Brasil e a Avaliação Acadêmica. 2022. (Seminário).

3.

(Plenary Speaker):10th Congress of the International Society of Theoretical Chemical Physics. Environment Contribution to Molecular Spectroscopy, Reactivity and Photochemistry.. 2019. (Congresso).

4.

Palestra na Universidade de Uppsala, Suécia.Theoretical Studies of Molecular Spectroscopy in Supercritical Environment. 2018. (Seminário).

5.

(Invited Speaker) Annual Conference of the Quantum World. Sequential QM/MM Studies of Molecular Spectroscopy in Supercritical Environment. 2017. (Congresso).

6.

(Invited Speaker): 9th Congress of the International Society of Theoretical Chemical Physics. Quantum Chemistry with Thermodynamic Condition. 2016. (Congresso).

7.

Mesa Redonda no Workshop na UDESC. A Pós graduação nos Próximos Dez Anos. 2016. (Congresso).

8.

Palestra Workshop dp Prog Pós Graduação da UDESC. (Palestra) Aplicações de Mecânica Quântica nas Cercanias do Ponto Crítico. 2016. (Congresso).

9.

(Invited Speaker) XX Quantum Systems in Chemistry and Physics. Quantum Systemas and Properties Along the Phase Diagram. 2015. (Congresso).

10.

(Invited Speaker) XII Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists. Electronic Structure of Atoms and Molecules in Supercritical Fluids. 2014. (Congresso).

11.

(Invited Speaker) XVII Quantum Systems in Chemistry and Physics. Solvent Effects on the Absorption Spectrum of Chlorophyll c. A Sequential QM/MM Study. 2012. (Congresso).

12.

(Invited Speaker) IX Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC). The Absorption Spectrum of Chlorophyll c in Methanol. A Sequential QM/MM Study. 2011. (Congresso).

13.

(Invited Speaker) Seventh International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering. Special Lectures Volume. 2009. (Outra).

14.

(Invited Speaker) XXXV Congresso de Químicos Teóricos de Expressão Latina. XXXV Congresso de Químicos Teóricos. 2009. (Congresso).

15.

2nd International Symposium on Molecular Modelling in Soil Research-Advances of molecular of biogeochemical interfaces - Perspectives for soil research. Solvent effects in chemical processes. Water-assisted proton transfer reaction of pterin in water. 2009. (Simpósio).

16.

8th Ibero-American Workshop on Complex Fluids and their Applications. 8th Ibero-American Workshop on Complex Fluids and their applications. 2009. (Outra).

17.

XXXII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. Sequential Monte Carlo-quantum mechanical study of N Nuclear Magnetic Shielding and n - #* absorption transition of pyrimidine. 2009. (Encontro).

18.

(Invited Speaker) 5 th International Meeting on Photodynamics. 5th International Meeting on Photodynamics. 2008. (Encontro).

19.

(Invited Speaker) Symposium in honor of Hans Lischka's 65th. Symposium in honor of Hans Lischka's 65th. 2008. (Simpósio).

20.

Cerimônia de outorga do título de Professor Emérito aos Profs. José David Viana e José de Lima Accioly. David e Golias: Átomos e Moléculas Sob o Efeito de Ambientes Líquidos. 2008. (Outra).

21.

IV Semana de Física da Universidade Estadual de Santa Cruz. Mistérios da Água. 2008. (Outra).

22.

VII Encontro Anual da Sociedade Brasileira de Pesquisa em Materiais. Molecular Properties in Solution. 2008. (Encontro).

23.

VI Workshop em Física Molecular e Espectroscopia. Novos Avanços na Compreensão de Efeitos de Solventes em Espectroscopia e Reatividade Molecular. 2008. (Outra).

24.

XXXI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. Efeito solvente na estrutura molecular: acoplamento eletrostático no método QM/MM sequencial. 2008. (Encontro).

25.

2007 Pan American Workshop on Molecular and Material Sciences: Theoretical and Computational Aspects. Recent developments and applications of the sequential QM/MM methodology to study solvent effects. 2007. (Outra).

26.

I Encontro de Físicos do Centro-Sul. Estrutura eletrônica de líquidos. Unindo mecânica quântica e mecânica estatística. 2007. (Encontro).

27.

Simpósio Brasileiro de Química Teórica. Electronic properties of liquid ammonia: a sequential QM/MM approach. 2007. (Simpósio).

28.

VII ERMAC -Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional - Universidade Federal de Uberlândia.Mistérios da água. 2007. (Encontro).

29.

XVII International Conference Horizons in Hydrogen Bond Research.Hydrogen bond interaction between a probe molecule and normal supercritical water. Influence on spectroscopic properties. 2007. (Outra).

30.

XXV Encontro de Físicos do Norte-Nordeste.Propriedades moleculares em água supercritica. 2007. (Encontro).

31.

XXXIII QUITEL - Congresso de Químicos e Teóricos e Expressão Latina. Efeitos de solvente em espectroscopia e reatividade molecular em ambiente líquido explícito. 2007. (Congresso).

32.

4th International Meeting on Photodynamics.Spectroscopy of Atoms and Molecules in Liquid Environment. Sequential Monte Carlo Quantum Mechanics Studies - Palestra Plenária. 2006. (Encontro).

33.

III International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering ? ICCMSE 2006. Molecular Polarization in Liquid Environment - Invited Speaker. 2006. (Congresso).

34.

III International Conference on Hydrogen Bonding and Molecular Interactions. Solute-Solvent Hydrogen Bonds and their Influence on Molecular Properties in Explicit Liquid Environment. 2006. (Congresso).

35.

IV Workshop em Física Molecular e Espectroscopia.Utlização de Método Híbrido QM/MM para Estudar Efeitos de Solventes em Espectroscopia Eletrônica. 2006. (Outra).

36.

Workshop Mathematics in Chemistry.Combined Monte Carlo-Quantum Mechanics Approach to Study Molecular Properties in Liquid Systems - Palestra Plenária. 2006. (Encontro).

37.

XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. A Sequential Monte Carlo Quantum Mechanics Calculations of Trans-Resveratrol in Aqueous Solution. 2006. (Encontro).

38.

45th Sanibel Symposium. A Sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Study of the Solvatochromic Shifts of Acrolein in Water e Solvent Effects on UV-VIS Absorption Spectra using Sequentially Monte Carlo and TD-DFT Calculations. 2005. (Outra).

39.

III Workshop em Física Molecular e Espectroscopia. III Workshop em Física Molecular e Espectroscopia. 2005. (Outra).

40.

Simpósio de Encerramento do Ano Internacional da Física. Simpósio de Encerramento do Ano Internacioanl da Física. 2005. (Simpósio).

41.

XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica - SBQT. Polarização Eletrônica em Líquidos. O Momento de Dipolo da Acetona, Methyl Orange in Aqueous Environment: A sequential Monte Carlo/Quantum Mechanics Investigation; The Contribution of Hydrogen Bond and Solvation Shells to the n-* Shift. 2005. (Simpósio).

42.

XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica. The UV Absorption and Emission Spectra of 2-Aminopurine Revised; The Relative Stability of the Two Isomers of AIP3. 2005. (Simpósio).

43.

XXIII Encontro de Físicos do Norte Nordeste. XXIII Encontro de Físicos do Norte Nordeste. 2005. (Encontro).

44.

XXVIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. A Comparative Study on the properties of Poly in a Solvent Free Environment e Interação Beta-Caroteno e Ácido Oléico: Investigação Experimental e Monte Carlo/Simulação Espectroscópica. 2005. (Encontro).

45.

XXXI Congresso Internacional de Químicos Teóricos de Expressão Latina. QUITEL. 2005. (Congresso).

46.

(Invited Speaker) Third International Meeting on Photodynamics. Third International Meeting on Photodynamics. 2004. (Outra).

47.

II Escola de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos, Laboratório Nacional de Computação Científica. Efeitos do Meio Aquoso na Estrutura e na Energia do Complexo Guanina-Citosina e Estudo das Ligações de Hidrogênio Formadas em Aglomerados de Pirazina e Água nas Fases Gasosa e Líquida. 2004. (Outra).

48.

II Workshop em Física Molecular e Espectroscopia. II Workshop. 2004. (Outra).

49.

IX Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica. Estudo Estrutural e Espectroscópico de Dioxinas Originadas da Combustão do PVC e Estabilidade Conformacional de Complexos Moleculares de Lactonitrila e Água. 2004. (Outra).

50.

Workshop 40 Anos de DFT - Teoria do Funcional da Densidade. Workshop 40 anos de DFT. 2004. (Outra).

51.

XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. Estudo Ab Initio das Propriedades Elétricas e Ópticas de Complexos Envolvendo Alcool e Água e Accurate Classical-Quantum Simulation for the Absorption Spectrum of the Hydrated Electron. 2004. (Encontro).

52.

2003 Sanibel Symposium. Solvents as Explicit Liquids using a Sequential Monte Carlo-Quantum Mechanics Methodology. 2003. (Simpósio).

53.

International Symposium in Honour to Prof. Osvaldo Goscinski. International Symposium in Honour to Prof. Osvaldo Goscinski. 2003. (Simpósio).

54.

School on Simulation Physics. Simulação Computacional de Líquidos, Propriedades Eletrônicas. 2003. (Outra).

55.

XII Simposio Brasileiro de Química Teórica. The UV Absorption Spectrum of Benzotriazol Tautomers e Nova Estrutura para Ligação de Hidrogênio entre Pirazina e Água. 2003. (Simpósio).

56.

XV th International Conference on Horizons in Hydrogen Bond Research. Modeling Molecules in the liquid Environment. 2003. (Outra).

57.

XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. Spectroscopic Properties of Hydrogen Bonded Molecular Clusters e Solvent Effects on Hydrogen Bonds of Biomoleculares. 2003. (Encontro).

Organização de eventos, congressos, exposições e feiras

1.

CANUTO, S. International Meeting on Photodynamics and Related Aspects. 2013. (Congresso).

2.

CANUTO, S. Coordenador Geral da I Escola Moleculas e Biomolecular. 2009. (Outro).

3.

DIAS, S.A. ; KREIN, G. ; MALBOUISSON, J.M.C. ; MORAES, F.J.S. ; OLIVEIRA, M.J. ; ROCHA-FILHO, T.M. ; VIANNA, J.D.M. ; **CANUTO, S.** ; KRAENKEL, R.A. . Membro do Comitê no II Encontro Nacional de Física Teórica e Computacional, UNESP, São Paulo, Abril. 2007. (Congresso).

4.

BARBOSA, M C ; FREIRE JR., FERANDO LAZARO ; ALMEIDA, R. ; GOMES, A. ; **CANUTO, S.** ; OLIVEIRA, L.E. ; PIMENTA, M. . Membro do Comitê na XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, São Lourenço, MG, Maio. 2006. (Congresso).

5.

CANUTO, S. Membro do Comitê Nacional - IX Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, Salvador, Julho. 2004. (Congresso).

6.

CANUTO, S. Membro do Comitê no XXIV QUITEL - Congresso de Químicos Teóricos de Expressão Latina. 2000. (Congresso).

7.

CANUTO, S. Membro do Comitê na 7ª Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica - Escola Jorge André Swieca - SBF. 2000. (Congresso).

8.

CANUTO, S. Coordenador Geral do XXI Encontro Nacional Física da Matéria Condensada. 1998. (Congresso).

9.

CANUTO, S. Coordenador Geral na IX Simpósio Brasileiro de Química Teórica. 1997. (Congresso).

10.

CANUTO, S. Coordenador Temático Física Atômica e Molecular no XX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. 1997. (Congresso).

11.

CANUTO, S. Coordenador Geral do Simposio Brasileiro de Química Teórica. 1997. (Congresso).

12.

CANUTO, S. Coordenador Geral na 2ª Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica - Escola Jorge André Swieca - SBF. 1989. (Congresso).

13.

CANUTO, S. Membro do Comitê no IV Simpósio Brasileiro de Química Teórica. 1987. (Congresso).

14.

CANUTO, S. Coordenador Geral na 1ª Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica - Escola Jorge André Swieca - SBF. 1987. (Congresso).

15.

CANUTO, S. Coordenador Temático Física Atômica e Molecular no X Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. 1987. (Congresso).

CANUTO, S. Coordenador Temático Física Atômica e Molecular na IX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. 1986. (Congresso).

Orientações

Orientações e supervisões em andamento

Tese de doutorado

1.

☺ Tárcius Nascimento Ramos. Espectroscopia de absorção de dois fótons em moléculas orgânicas incluindo efeitos do solvente. Início: 2016. Tese (Doutorado em física) - Instituto de Física da USP, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. (Orientador).

2.

☺ Danilo Pires Valverde. Dinâmica de estados excitados e propriedades espectroscópicas de nucleosídeos fluorescentes sintéticos: sondas para investigações estruturais de RNA e DNA. Início: 2016. Tese (Doutorado em física) - Instituto de Física da USP, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. (Orientador).

Supervisão de pós-doutorado

1.

Marcelo Hidalgo Cardenuto. Início: 2016. Instituto de Física da USP, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo.

Orientações e supervisões concluídas

Dissertação de mestrado

1.

☺ Argel Nasir Sosa Nuñez. Estudo Teórico da Espectroscopia da Clorofila d. 2017. Dissertação (Mestrado em FÍSICA) - Instituto de Física da USP, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

2.

☺ Ricardo Lima. Propriedades eletrônicas e estruturais de fluidos supercríticos. Avaliação de campos de força para descrição do espectro de absorção da paranitroanilina em CO₂ supercrítico. 2016. Dissertação

3.

📄 Tárcius Nascimento Ramos. Efeitos de Solventes nos Espectros de Absorção e Emissão da Dimethoxy Curcumin. 2015. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo, . Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

4.

📄 George Barbosa Araujo. Estudo Teórico das Propriedades Óticas e Magnéticas de Derivados e Intermediários da Reação de Oxidação do Triptofano. 2013. Dissertação (Mestrado em FÍSICA) - Instituto de Física da USP, . Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

5.

📄 Carlos Eduardo Bistafa da Silva. Efeitos de Solvente no Espectro de Absorção da 5-Fluorouracil. Análise de Diferentes Procedimentos Teóricos. 2011. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

6.

📄 Fernando da Silva. Estudo Teórico de Propriedades Eletrônicas e da Solvatação de Carbonatos Orgânicos em Meio Aquoso. 2011. Dissertação (Mestrado em Doutorado e mestrado em Física) - Universidade de São Paulo, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

7.

📄 Lucas Modesto da Costa. Espectroscopia de Alcalinos em Hélio Líquido. 2010. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

8.

📄 Rafael Carvalho Barreto. Propriedades Eletrônicas de Líquidos Homogêneos. 2006. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

9.

Daniel Rodrigo Ferreira Trzesniak. Modelagem Quântica de Inibidores Enzimáticos. 2002. 102 f. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

10.

☺ Thaciana Valentina Malaspina Fileti. Estudo Clássico-Quântico de Ligações de Hidrogênio em Meio Líquido: Piridina em Solução Aquosa. 2002. 67 f. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

11.

☺ Ivam Pereira Mendes Neto. Estudos de Mudanças Conformacionais de Moléculas Flexíveis em Meio Solvente: Implementação em Simulação Monte Carlo e Aplicações. 2002. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

12.

Valdemir Eneas Ludwig. Estudo Teórico das Propriedades Espectroscópicas do Complexo Guanina-Citosina. 2001. 0 f. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

13.

☺ Eduardo Augusto Rissi. Propriedades Estruturais e Espectroscópicas de Fosfinas, Nítrilas e suas Ligações de Hidrogênio com Água. 2000. 0 f. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

14.

☺ Karla Maria Longo. Estudo sobre a Estabilidade do Anion Molecular BeF_2^- . 1991. 0 f. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

15.

M.A. CASTRO. Estudo Teórico da Estrutura do CO_3 . 1989. 0 f. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

16.

E G Lima. Estudo Completo até Quarta Ordem em MBPT para o Estado Fundamental do SiS e suas Formas Protonadas. 1987. 0 f. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

17.

Pedro S. Campos Filho. Estudos Teóricos de excitações Eletrônicas em Moléculas. 1986. 0 f. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

18.

L B Dantas. Ionização e Excitação de Elétrons em Camadas Profundas no SiF e no SiF₂. 1986. 0 f. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

19.

M R Chacon. Excitação Vibracional por Fotoionização de Elétrons em Camada Profundas. 1985. 0 f. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

20.


J R Silva. O Método de Fatorização Aplicado a problemas - Modelos de Estados Metaestáveis no Hidrogênio. 1985. 0 f. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

21.


A Cesar. Estudo Teórico de Transições Eletrônicas em Moléculas Envolvendo Elétrons em Camadas Profundas. 1984. 0 f. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Minas Gerais, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

Tese de doutorado


1.

 Tarcius N Ramos. Espectroscopia de Absorção de Dois Fótons em Moléculas Orgânicas Incluindo Efeitos de Solvente. 2020. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

2.

 Danillo Pires Valverde. Dinâmica de Estados Excitados e Propriedades Espectroscópicas de Derivados de DNA/RNA Naturais e Sintéticos em Meio Solvente. 2020. Tese (Doutorado em física) - Instituto de Física da USP, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

3.

 CARLOS EDUARDO BISTAFA DA SILVA. Estudo Teórico de Estados Excitados de Moléculas Orgânicas em Solvente. 2015. Tese (Doutorado em física) - Instituto de Física da USP, . Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

4.

👤 Lucas Modesto Costa. Um tratamento Multiescala (QM/MM) das Propriedades Espectroscópicas da Tetraciclina e seus Complexos com Mg e Eu em água. 2014. Tese (Doutorado em física) - Instituto de Física da USP, . Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

5.

👤 Marcelo Hidalgo Cardenuto. Propriedades Eletrônicas de Átomos e Moléculas em Fluidos Supercríticos. 2013. Tese (Doutorado em física) - Instituto de Física da USP, . Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

6.

👤 Rodrigo do Monte Gester. Estudos Teóricos dos Efeitos de Solventes em Propriedades Magnéticas, eletrônicas e em Processos Reativos. 2012. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

7.

👤 Yoelvis Orozco Gonzáles. Simulação computacional e métodos QM/MM para espectroscopia de absorção e emissão. 2012. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

8.

👤 Rafael Carvalho Barret. Simulação de Propriedades Estruturais e Eletrônicas de Agregados, Líquidos Regulares e Supercríticos. 2010. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

9.

👤 Lucas Modesto da Costa. Caracterização espectroscópica de indicadores de tetraciclina complexada em europio. 2010. Tese (Doutorado em física) - Instituto de Física da USP, . Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

10.

👤 Marcelo Hidalgo Cardenuto. Efeitos de solvente em betaínas e relações solvatocrômicas. 2009. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

11.

👤 Thaciana Valentina Malaspina Fileti. Estabilidade Isomérica e Ligações de Hidrogênio em Agregados e Líquidos Moleculares. 2006. 0 f. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo, Conselho

12.

Valdemir Eneas Ludwig. Estrutura Eletrônica e Interações Intermoleculares em Líquidos. 2005. 0 f. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

13.

☺ Eduardo Augusto Rissi. Estudo de Ligações de Hidrogênio via Métodos de Química Quântica e via Teoria do Funcional da Densidade. 2004. 0 f. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

14.

Eudes Eterno Fileti. Moléculas em Aglomerados e em Meio Líquido. 2004. 0 f. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

15.

☺ Roberto Rivelino de Melo Moreno. Efeitos de Ligações de Hidrogênio em Propriedades de Aglomerados e de Líquidos Moleculares. 2003. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

16.

☺ Sérgio Minoru Urahata. Efeito Hidrofóbico; Aplicação de Modelos Clássico e Quântico no Sistema Benzeno-Água. 1999. 0 f. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

17.

Agostinho Serrano de Andrade Neto. Estudo Teórico de Propriedades de Moléculas Isoladas e em Meio Solvente. 1999. 0 f. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

18.

☺ Nestor Cortez Saavedra Filho. Estudo de Ligações de Hidrogênio e sua Influência nas Propriedades Ópticas e Elétricas de Moléculas Orgânicas em Meio Solvente. 1999. 0 f. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

19.

CARLOS ROBERTO MARTINS DA CUNHA. Forças Intermoleculares: Propriedades Estruturais e Eletrônicas de Clusters de van der Waals. 1997. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

20.

KALINE RABELO COUTINHO. Modelo Discreto de Solvente. Solvatocromismo no Espectro de Absorção Molecular. 1997. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de São Paulo, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Coorientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

21.

M.A. CASTRO. Cálculos de propriedades Elétricas de átomos e Moléculas. 1992. 0 f. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

Supervisão de pós-doutorado

1.

Marcelo Hidalgo Cardenuto. 2018. Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

2.

Evanildo Gomes Lacerda Júnior. 2017. Instituto de Física da USP, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

3.

Vinícius Manzoni Vieira. 2016. Instituto de Física da USP, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Alagoas. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

4.

Evanildo Gomes Lacerda Júnior. 2016. Instituto de Física da USP, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

5.

Yansel Omar Guerrero Martínez. 2016. Instituto de Física da USP, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

6.

Yoelvis Orozco Gonzalez. 2014. Instituto de Física da USP, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

7.

Paula Andreia Jaramillo Garcia. 2013. Instituto de Física da USP, . Sylvio Roberto Accioly Canuto.

8.

Daniel Luiz da Silva. 2013. Universidade de São Paulo, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

9.

Paula Andreia Jaramillo Garcia. 2012. Instituto de Física da USP, . Sylvio Roberto Accioly Canuto.

10.

Ednilson Orestes. 2012. Instituto de Física da USP, . Sylvio Roberto Accioly Canuto.

11.

João Pedro Bettencourt Cepeda Malhado. 2012. Universidade de São Paulo, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

12.

Paula Andreia Jaramillo Garcia. 2011. Instituto de Física da USP, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

13.

Endilson Orestes. 2011. Instituto de Física da USP, . Sylvio Roberto Accioly Canuto.

14.

Daniel Luiz Silva. 2011. Instituto de Física da USP, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

15.

Paula Andreia Jaramillo Garcia. 2010. Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

16.

Daniel Luiz da Silva. 2010. Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

17.

Ednilson Orestes. 2010. Universidade de São Paulo, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

18.

Vinicius Manzoni Vieira. 2010. Universidade Federal de Alagoas, . Sylvio Roberto Accioly Canuto.

19.

Herbet C.Georg. 2009. Universidade de São Paulo, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

20.

Ednilsom Orestes. 2009. Universidade de São Paulo, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

21.

Daniel Luiz da Silva. 2009. Universidade de São Paulo, . Sylvio Roberto Accioly Canuto.

22.

Paula Andreia Jaramillo Garcia. 2009. Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

23.

Herbet C.Georg. 2008. Universidade de São Paulo, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

24.

Paula Andreia Jaramillo Garcia. 2008. Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Sylvio

Roberto Accioly Canuto.

25.

Paula Andrea Jaramillo Garcia. 2007. Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

26.

Herbet C.Georg. 2007. Universidade de São Paulo, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

27.

Valdemir Eneias Ludwig. 2006. Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

28.

Roberto Rivelino de Melo Moreno. 2004. Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

29.

Puspitapallab Chaudhuri. 2001. Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Sylvio Roberto Accioly Canuto.

Iniciação científica

1.

Fernando da Silva. Propriedades magnéticas de moléculas orgânicas. Parâmetros de NMR. 2009. Iniciação Científica. (Graduando em Física) - Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

2.

Carlos Eduardo Bistafa da Silva. Espectroscopia de Moléculas Biológicas. 2009. Iniciação Científica. (Graduando em Física) - Universidade de São Paulo, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Orientador: Sylvio Roberto Accioly Canuto.

Outras informações relevantes

Membro Do Conselho Superior da CAPES (representante do CTC-ES) Member of the International Jury for the Unesco-L'Oréal award "For Women in Science", 2011, 2013, 2015 e 2017. Membro do Advisory Editorial Board of the Chemical Physics Letters (2003-2009); Membro do Editorial Board of the International Journal of Quantum Chemistry (desde 2001); Specialist Editor of the Computer Physics Communications (1987-1990, 2002-2006); Membro do Scientific Advisory Board of the Journal of the Argentine Chemical Society; Associate Editor of the Brazilian Journal of Physics (2000-2009); Editorial Board of the Advances in Physical Chemistry (online journal) Editorial Advisory Board of the Current Physical Chemistry (online journal) Membro do Comitê Assessor de Física/Astronomia do CNPq (jul/2001-jul/2003) e Presidente do CA (2001-2002); Consultor ad hoc para as agências: CNPq, CAPES, FAPESP, FAPEMIG, FACEPE, FAPDF, FAPERGS, FINEP, FAPERJ, CONICYT, The World Academy of Sciences; Membro do Comitê da CAPES para avaliação de programas de pós-graduação (1999-2004); Árbitro de cerca de um total de 40 revistas em Física (incluindo Phys Rev. Lett, Phys. Rev. A, B e E, etc), Química (incluindo J. Am. Chem. Soc, J. Phys. Chem. A e B, J. Chem. Phys., etc.) e Biologia. (incluindo J. Theoret. Biol.); Organizador ou membro de Comitê organizador, ou Comitê de honra de um sem-número de conferências nacionais, internacionais; Palestrante convidado Plenário em cerca de 300 conferências internacionais na área de Físico-química, Química Quântica e Física Molecular e seminários (incontáveis) em diversas instituições nacionais e internacionais. (02/0