

---

# List of Participants

---

DOI 10.1002/qua.10695

**Adalberto Corella Madueño**

Departamento de Física, Universidad de  
Sonora, Mexico  
E-mail: [acorella@fisica.uson.mx](mailto:acorella@fisica.uson.mx)

**Adelia Justina Aguiar Aquino**

University of Vienna/AUSTRIA, Research  
Centers, Seibersdorf  
E-mail: [adelia.aquino@univie.ac.at](mailto:adelia.aquino@univie.ac.at)

**Ademir Joao Camargo**

IQSC-USP-SC  
E-mail: [ajc@iqsc.sc.usp.br](mailto:ajc@iqsc.sc.usp.br)

**Adevalton Bernardo dos Santos**

Universidade Federal de Uberlandia  
E-mail: [adevalton@ras.ufu.br](mailto:adevalton@ras.ufu.br)

**Adriane Schneider Falck**

UFSC  
E-mail: [afalck@bol.com.br](mailto:afalck@bol.com.br)

**Agostinho Serrano de Andrade Neto**

ULBRA  
E-mail: [serrano@ulbra.br](mailto:serrano@ulbra.br)

**Alejandro Lopez Castillo**

Centro Universitario FIEO—Osasco  
E-mail: [alopezcastillo@uol.com.br](mailto:alopezcastillo@uol.com.br)

**Alessandra Ferreira Albernaz Vilela**

UnB  
E-mail: [alessan@fis.unb.br](mailto:alessan@fis.unb.br)

**Alex Gutterres Taranto**

UFF  
E-mail: [alex@kabir.gqt.uff.br](mailto:alex@kabir.gqt.uff.br)

**Alexander Luz Sperandio**

USP  
E-mail: [aluz@if.usp.br](mailto:aluz@if.usp.br)

**Alexander Martins da Silva**

Dept. Físico-Química/UFRJ  
E-mail: [alex@chaer.iq.ufrj.br](mailto:alex@chaer.iq.ufrj.br)

**Alexandre Abdalla Araújo**

IFGW-UNICAMP  
E-mail: [alexa@ifi.unicamp.br](mailto:alexa@ifi.unicamp.br)

**Alexandre Amaral Leitão**

Instituto de Física—UFRJ  
E-mail: [amaral@if.ufrj.br](mailto:amaral@if.ufrj.br)

**Alexandre B. Rocha**

Universidade Federal do Rio de Janeiro  
E-mail: [rocha@if.ufrj.br](mailto:rocha@if.ufrj.br)

**Alexandre Nelson Martiniano Carauta**

Universidade Federal Fluminense  
E-mail: [ancarauta@uol.com.br](mailto:ancarauta@uol.com.br),  
[carauta@gerraff.gqt.uff.br](mailto:carauta@gerraff.gqt.uff.br)

**Alexandre Taschetto de Castro**

Instituto de Projetos Especiais  
E-mail: [taschetto@hexanet.com.br](mailto:taschetto@hexanet.com.br)

**Alexandre Figueiredo Lago**

Universidade Federal de Rio de Janeiro  
E-mail: [alexlago@iq.ufrj.br](mailto:alexlago@iq.ufrj.br)

**Alfredo Mayall Simas**

UFPE  
E-mail: [simas@npd.ufpe.br](mailto:simas@npd.ufpe.br)

**Aline Thais Bruni**

IQ-UNICAMP  
E-mail: [alinetb@df.ibilce.unesp.br](mailto:alinetb@df.ibilce.unesp.br)

**Alvaro Antonio Alencar de Queiroz**

Escola Federal de Engenharia de Itajubá  
E-mail: [alencar@efe.br](mailto:alencar@efe.br)

**Amarilis de Vicente Finageiv Neder**

UnB  
E-mail: [finageiv@unb.br](mailto:finageiv@unb.br)

## LIST OF PARTICIPANTS

### **Amary Cesar Ferreira**

UFMG

E-mail: yrra@dedalus.lcc.ufmg.br

### **Américo T. Bernardes**

Departamento de Física, ICEB, UFOP

E-mail: atb@iceb.ufop.br

### **Ana Carolina Roma**

UFS

E-mail: freire@infonet.com.br

### **Ana Claudia Monteiro Carvalho**

UNICAMP—IFGW—DFMC

E-mail: ana@ifi.unicamp.br

### **Ana Paula Lamounier**

Universidade Federal de Minas Gerais

E-mail: anapaula@netuno.qui.ufmg.br

### **Ana Paula Souza Santos**

UFS

E-mail: paulinha19@uol.com.br

### **Anderson Coser Gaudio**

Universidade Federal do Espírito Santo

E-mail: anderson@npd.ufes.br

### **Anderson da Silva Moreira**

Departamento de Física, Universidade

Federal de Juiz de Fora

E-mail: anderson@fisica.ufjf.br

### **Andre Bueno Machado**

Universidade de Brasília

E-mail: andrem@helium.fis.unb.br

### **Andre de Campos**

UFSC

E-mail: fsc3and@fsc.ufsc.br

### **Andre Farias de Moura**

Departamento de Química—Universidade

Federal de São Carlos

E-mail: andre@qt.dq.ufscar.br

### **Andre Gustavo Horta Barbosa**

Instituto de Química—UFRJ

E-mail: andre@chaer.iq.ufrj.br

### **Andre Ota**

Universidade Estadual de Londrina

E-mail: tsutomu@uel.br

### **Andre Severo Pereira Gomes**

Instituto de Química, Unicamp

E-mail: picapau@iqm.unicamp.br

### **Andre Tsutomu Ota**

Universidade Estadual de Londrina

E-mail: tsutomu@uel.br

### **Andrea Dias Quintao**

Universidade Metodista de São Paulo

E-mail: aquintao@metodista.br

### **Angelo Marconi Maniero**

IF—Universidade de Brasília

E-mail: angelo@helium.fis.unb.br

### **Angelo Rober Pulici**

UNESP

E-mail: arpulici@aol.com

### **Anivaldo Xavier de Souza**

Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro

E-mail: anivaldo@fis.puc-rio.br

### **Anna Maria Canavarro Benite**

Universidade Federal do Rio de Janeiro

E-mail: annabenite@aol.com

anna@iq.ufrj.br

### **Annibal Dias Figueiredo Neto**

Universidade de Brasília

E-mail: annibal@fis.unb.br

### **Antenor Jorge Parnaíba da Silva**

Universidade Federal de Pernambuco

E-mail: antenor.parnaiba@dqfex.ufpe.br

### **Antonio Augusto Souza Brito**

PIC Informatica

E-mail: brito@picinfo.com.br

### **Antonio Canal Neto**

Universidade Federal do Espírito

Santo—UFES

E-mail: canal@cce.ufes.br

### **Antonio Carlos Borin**

Instituto de Química—Universidade de São Paulo

E-mail: ancborin@iq.usp.br

### **Antonio Carlos de Oliveira Guerra**

UFRJ

E-mail: antoniocoguerra@bol.com.br

### **Antonio Carlos Pavao**

Universidade Federal de Pernambuco

E-mail: pavao@npd.ufpe.br

**Antonio Carlos Senges Lino**  
Unicamp  
E-mail: Chilino\_99@yahoo.com

**Antonio Eduardo da Hora Machado**  
Universidade Federal de Uberlândia—  
Instituto de Química  
E-mail: aeduardo@ufu.br

**Antonio J. Hernandez**  
Universidade Simon Bolivar  
E-mail: ajher@usb.ve

**Antônio José do Nascimento Fernandes**  
Universidade Federal do Amazonas  
E-mail: ajose9599@yahoo.com

**Antonio Luciano de A. Fonseca**  
UnB  
E-mail: alaf@fis.unb.br

**Antonio Luiz Oliveira de Noronha**  
UFMG  
E-mail: alonoronha@yahoo.com

**Antonio Moreira de C. Sobrinho**  
UFSCar  
E-mail: moreira@df.ufscar.br

**Aparecido de Arruda Sobrinho**  
UFSCar  
E-mail: aarrudas@terra.com.br

**Araken dos Santos Werneck Rodrigues**  
Universidade Católica de Brasília  
E-mail: arakenwerneck@uol.com.br

**Arantes Junior**  
Universidade Federal de Uberlândia—UFU  
E-mail: jjunior@alunos.ufu.br

**Armando de Lima Filho**  
Universidade Federal do Parana—UFPR  
E-mail: quim@quimica.ufpr.br

**Artur Gomes da Silva Neto**  
Instituto Tecnológico de Aeronáutica  
E-mail: artur2304@yahoo.com.br

**Ataualpa A. C. Braga**  
IQ-UNICAMP  
E-mail: atabraga@iqm.unicamp.br

**Augusto Faria Oliveira**  
UFMG  
E-mail: augustof@netuno.qui.ufmg.br

**A. Toro-Labbé**  
Pontificia Universidad Católica de Chile,  
Chile  
E-mail: pjaque@puc.cl

**Beatriz Alves Ferreira**  
FACIBIS, Unicentro Newton Paiva, Belo  
Horizonte, MG, Brasil, 30460-000  
E-mail: beatriz@netuno.qui.ufmg.br

**Benedito Lobato**  
CEFET-PA/UFPA  
E-mail: benedito.lobato@cefetpa.br

**Berenice da Silva Junkes**  
Universidade Federal de Santa Catarina  
E-mail: berenice@qmc.ufsc.br

**Bernardo Laks**  
IFGW-UNICAMP  
E-mail: laks@ifi.unicamp.br

**Bianca da Cunha Machado**  
Instituto de Química UFRJ  
E-mail: bianca@iq.ufrj.br

**Boaz Galdino de Oliveira**  
UFPB  
E-mail: boazgaldino@bol.com.br

**Carla Grazielle Duraes**  
Unicentro Newton Paiva  
E-mail: carlagraz@hotmail.com

**Carlile Campos Lavor**  
Universidade Federal do Rio de Janeiro  
E-mail: carlile@cos.ufrj.br

**Carlos Eduardo Bielschowsky**  
Instituto de Química da UFRJ  
E-mail: biel@iq.ufrj.br

**Carlos Eduardo Resende Prado**  
Universidade Federal de São Carlos  
E-mail: carlos@qt.dq.ufscar.br

**Carlos Frederico de Souza Castro**  
Universidade Católica de Brasília—Curso de  
Química  
E-mail: fred@ucb.br

**Carlos Henrique Ferreira Almeida**  
UFRJ  
E-mail: karrique@bol.com.br

**Carmen Lucia de O. Mendes**  
Instituto de Química—UFRJ  
E-mail: clu@iq.ufrj.br

## LIST OF PARTICIPANTS

### **Cassia Curan Turci**

Universidade Federal do Rio de Janeiro  
E-mail: cassia@iq.ufrj.br

### **Cesar Augusto Fernandes de Oliveira**

UFRJ  
E-mail: cesaraugusto@cade.com.br

### **Cintia Beatriz de Oliveira**

Instituto de Química de São Carlos—USP  
E-mail: cintia@iqsc.sc.usp.br

### **Clarissa Oliveira Silva**

DFQ-IQ/UFRJ  
E-mail: clarissa@chaer.iq.ufrj.br

### **Claudia de Figueiredo Braga**

Universidade Federal de Pernambuco  
E-mail: claudiafb@bol.com.br

### **Claudio Nahum Alves**

UFPA  
E-mail: nahum@ufpa.br

### **Cleber N. Borges**

IQM-Instituto de Química, Unicamp  
E-mail: cborges@iqm.unicamp.br

### **Cristina Porto Goncalves**

Departamento de Física/ICEx  
E-mail: crispg@fisica.ufmg.br

### **Cristina Saldanha Pereira**

UFSCar  
E-mail: crisaldanha@yahoo.com

### **Curt Max de Avila Panisset**

Universidade de Brasília  
E-mail: curtmax@unb.br

### **Daniel Laria**

Universidade de Buenos Aires  
E-mail: dhlaria@cnea.gov.ar

### **Daniel Lima Nascimento**

UnB  
E-mail: alaf@fis.unb.br

### **Daniel Trzesniak**

USP  
E-mail: drtrzes@if.usp.br

### **Davi Serradella Vieira**

USP  
E-mail: serradella@yahoo.com

### **David C. Clary**

Department of Chemistry, University College  
London, 20 Gordon Street, London, U.K.  
E-mail: d.c.clary@ucl.ac.uk

### **Douglas Soares Galvao**

IFGW-UNICAMP  
E-mail: galvao@ifi.unicamp.br

### **Eder Severino Xavier**

UFMG  
E-mail: eder@netuno.qui.ufmg.br

### **Edgardo Garcia**

IQ—UNB  
E-mail: garciae@unb.br

### **Edilson Clemente da Silva**

Universidade Federal do Rio de Janeiro  
E-mail: ecds@chaer.iq.ufrj.br

### **Edmar Moraes do Nascimento**

Universidade Federal de São  
Carlos/Universidade Federal da Bahia  
E-mail: edmar@df.ufscar.br

### **Eduardo Fischli Laschuk**

Instituto de Química—UFRGS  
E-mail: fischli@iq.ufrgs.br

### **Eduardo Lemos de Sa**

Universidade Federal do Parana  
E-mail: edulsa@quimica.ufpr.br

### **Eduardo Monteiro Martins**

DFQ-IQ-UFRJ  
E-mail: eduardo@iq.ufrj.br

### **Eduardo Rissi**

IFUSP  
E-mail: earissi@if.usp.br

### **Elaine Fontes Ferreira da Cunha**

UFRJ  
E-mail: elainecunha@hotmail.com

### **Elisa Soares Leite**

Universidade Federal de São Carlos  
E-mail: elisa@qt.dq.ufscar.br

### **Emerson Allevato Furtado**

Departamento de Físico-Química/UFRJ  
E-mail: emerson@chaer.iq.ufrj.br

### **Emerson Joucoski**

Universidade Federal do Parana  
E-mail: joucoski@fisica.ufpr.br

**Emilio A. Squitieri**

Universidade Central de Venezuela  
E-mail: esquitie@strix.ciens.ucv.ve

**Emmanuela Ferreira de Lima**

UFPB  
E-mail: manuquimica@yahoo.com

**Ernesto Raul Caffarena**

Instituto de Biofísica Carlos Chagas  
Filho—UFRJ  
E-mail: ernesto@biof.ufrj.br

**Eudes Eterno Fileti**

IFUSP-SP  
E-mail: fileti@if.usp.br

**Fabio Alberto de Molfetta**

Instituto de Química de São Carlos  
E-mail: famolfetta@iqsc.sc.usp.br

**Fabio Zappa**

IF-UFRJ  
E-mail: zappa@if.ufrj.br

**Fabricio da Costa Silva**

DFQ-IQ/UFRJ  
E-mail: fcosta@eq.ufrj.br

**Fernanda Marur Mazze**

USP—FFCLRP  
E-mail: femazze@yahoo.com

**Fernando Hallwass**

Universidade Federal de Pernambuco—DQF  
E-mail: hallwass@npd.ufpe.br

**Fernando Luis B. da Silva**

FCFRP—Universidade de São Paulo  
E-mail: fernando@fc.unesp.br

**Fernando Rei Ornellas**

Instituto de Química—Universidade de São Paulo  
E-mail: frornell@usp.br

**Fernando Soares Emerick**

UFMG  
E-mail: emerick@netuno.qui.ufmg.br

**Flavia Pirola Rosselli**

USP—So Carlos  
E-mail: frosselli@iqsc.sc.usp.br

**Flavia Rolim de Almeida**

Departamento de Física/ICEX/UFMG  
E-mail: flavia@fisica.ufmg.br

**Francisco Bolivar Correto Machado**

Instituto Tecnológico de Aeronáutica  
E-mail: fmachado@ief.ita.cta.br

**Francisco Carlos Lavarad**

Dept. Física—Fac. Ciências—UNESP/Bauru  
E-mail: lavarda@fc.unesp.br

**Francisco Elias Jorge**

Universidade Federal do Espírito Santo  
E-mail: jorge@cce.ufes.br

**Francisco Jose Braga Ferreira**

Departamento de Física da Faculdade de Ciências—Unesp-Bauru, Bauru, SP, Brasil  
E-mail: fjbferreira@uol.com.br

**Francislê Neri de Souza**

Universidade de Aveiro  
E-mail: fns@dte.ua.pt

**Frank Weinhold**

Department of Chemistry, University of Wisconsin-Madison, U.S.A.  
E-mail: weinhold@chem.wisc.edu

**Frans B. van Duijneveldt**

Theoretical Chemistry Group, University of Utrecht, Utrecht, The Netherlands  
E-mail: j.g.c.m.vanderijdt@chem.uu.nl

**Freddy Fernandes Guimaraes**

UFMG  
E-mail: freddy@carbono.qui.ufmg.br

**Fulvia M. L. G. Stamato**

DQ-UFSCar  
E-mail: fulvia@dq.ufscar.br

**Geerd Diercksen**

Max Planck Institut Astrophysik, Garching, Alemanha  
E-mail: diercksen@mpa-garching.mpg.de

**Geison Voga Pereira**

UFMG  
E-mail: geison@platina.qui.ufmg.br

**Georgia Maria Amaral Junqueira**

NEQC-UFJF/LQCM-UFMG  
E-mail: georgia@netuno.qui.ufmg.br

**Geraldo Magela e Silva**

UnB  
E-mail: magela@fis.unb.br

## LIST OF PARTICIPANTS

**Geraldo Roberto Friedermann**  
Universidade Federal do Parana  
E-mail: grf@quimica.ufpr.br

**Gerardo Gerson Bezerra de Souza**  
Universidade Federal de Rio de Janeiro  
E-mail: gerson@iq.ufrj.br

**Gerd Bruno da Rocha**  
Dept. de Quim. Fundamental—UFPE  
E-mail: gbr@npd.ufpe.br

**Gernot Frenking**  
Philipps-Universität Marburg, Fachbereich  
Chemie, Marburg, Germany  
E-mail: frenking@chemie.uni-marburg.de

**Gilson Rodrigues Ferreira**  
NEQC UFJF  
E-mail: gilson@acad.ufjf.br

**Ginette Jalbert de Castro Faria**  
Instituto de Física/UFRJ  
E-mail: ginette@if.ufrj.br

**Giovanni Finoto Caramori**  
Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de  
Ribirão Preto—USP  
E-mail: gfcaramori@ig.com.br

**Glaucia Rosângela Peglow Borges**  
UNESP  
E-mail: glauciar@df.ibilce.unesp.br

**Glauciete S. Maciel**  
IQ-UNB  
E-mail: ciete@unb.br

**Glauco Favilla Bauerfeldt**  
DFQ-IQ-UFRJ  
E-mail: glauco@iq.ufrj.br

**Gracelie Serpa Schulz**  
Grupo de Química Teórica—UFRGS  
E-mail: gracelie@iq.ufrgs.br

**Graciela Arbilla de Klachquin**  
Instituto de Química da UFRJ  
E-mail: graciela@iq.ufrj.br

**Guilherme Mazzotti**  
UFPB  
E-mail: iug23@ig.com.br

**Guilherme Menegon**  
IQUSP  
E-mail: garant@iq.usp.br

**Gustavo Henrique Brancaleoni**  
USP—Rib. Preto-SP  
E-mail: ghleoni@convex.com.br

**Gustavo moreira menezes**  
Instituto de Química—UFRJ  
E-mail: cmenezes@uninet.com.br

**Hans Ågren**  
Royal Institute of Technology, Stockholm,  
Sweden  
E-mail: hans.agren@neurotec.ki.se

**Hans Lischka**  
Institute for Theoretical Chemistry and  
Structural Biology, University of Vienna,  
Vienna, Austria  
E-mail: hans.lischka@univie.ac.at

**Harley Paiva Martins Filho**  
Universidade Federal do Paraná  
E-mail: hpmf@quimica.ufpr.br

**Heitor Avelino de Abreu**  
UFMG  
E-mail: heitor@plutao.qui.ufmg.br

**Helcio Jose Batista**  
UFPE  
E-mail: helcio@npd.ufpe.br

**Helder Couto**  
Universidade Federal de Juiz de Fora  
E-mail: couto@fisica.ufjf.br

**Helena Duani**  
UFMG  
E-mail: helena@netuno.qui.ufmg.br

**Hélio Anderson Duarte**  
Laboratório de Química Computacional e  
Modelagem Molecular (LQC-MM)  
Departamento de Química, ICEx, UFMG  
E-mail: duarteh@netuno.qui.ufmg.br

**Hélio Ferreira Dos Santos**  
NEQC: Núcleo de Estudos em Química  
Computacional, Depto. Química, UFJF  
E-mail: helius@quimica.ufjf.br

**Hellinton Hatsuo Takada**  
Instituto Tecnológico de Aeronáutica  
E-mail: hellistaka@bol.com.br

**Herbert de Castro Georg**  
Instituto de Física/USP  
E-mail: hcgeorg@if.usp.br

**Hermes F. Souza**  
IQ/UNICAMP  
E-mail: hermes@iqm.unicamp.br

**Hubert Stassen**  
Instituto de Química/UFRGS  
E-mail: gullit@iq.ufrgs.br

**H. Bernhard Schlegel**  
Department of Chemistry, Wayne State  
University, Detroit, Michigan, 48202, U.S.A.  
E-mail: hbs@chem.wayne.edu

**Icaro Sampaio Paulino**  
Universidade Estadual de Campinas  
E-mail: icaro@iqm.unicamp.br

**Ione Iga**  
Departamento de Química, Universidade  
Federal de São Carlos  
E-mail: diig@power.ufscar.br

**Iram Marcelo Gleria**  
Universidade Católica de Brasília  
E-mail: iram@ucb.br

**Itamar Borges Junior**  
Departamento de Físico-Química, Instituto  
de Química, Universidade Federal do Rio de  
Janeiro  
E-mail: itamar@chaer.iq.ufrj.br

**Ivam Pereira Mendes Neto**  
Instituto de Física da USP  
E-mail: ivam@if.usp.br

**Ivan Milas**  
DFQ/IQ/UFRJ  
E-mail: imilas@chaer.iq.ufrj.br

**Ivana Pereira Sanches**  
Universidade Federal de São Carlos  
E-mail: ivana@dq.ufscar.br

**Ivy Calandrelli**  
Faculdade de Filosofia Ciências e Letras -  
Universidade de São Paulo  
E-mail: ivy@usp.br

**Jackson Antonio Lamounier Camargos Resende**  
Universidade Federal de Uberlândia  
E-mail: jackluz@rocketmail.com

**Jacques Fernandes Dias**  
IME  
E-mail: jacques@epq.ime.eb.br

**Jadson Claudio Belchior**  
UFMG  
E-mail: jadson@carbono.qui.ufmg.br

**James J. P. Stewart**  
Stewart Computational Chemistry,  
Paddington Circle, Colorado Springs,  
CO80921-2512, U.S.A.  
E-mail: jstewart@fujitsu.com

**Jeanne G. C. M. van Duijneveldt-van de Rijdt**  
Theoretical Chemistry Group, University of  
Utrecht, Utrecht, The Netherlands  
E-mail: j.g.c.m.vanderijdt@chem.uu.nl

**Joacy Vicente Ferreira**  
Universidade Federal de Pernambuco  
E-mail: joacyferreira@bol.com.br

**Joao Batista Lopes Martins**  
Universidade de Brasília  
E-mail: lopes@unb.br

**Joao Bosco Paraiso da Silva**  
UFPE  
E-mail: paraiso@npd.ufpe.br

**Joao Carlos Moretto**  
Universidade Federal do Paraná—UFPR  
E-mail: quim@quimica.ufpr.br

**Joao Otavio M. A. Lins**  
Instituto de Química da UFRJ  
E-mail: jomal@chaer.iq.ufrj.br

**Joaquim Delphino Da Motta Neto**  
Universidade Federal do Paraná—UFPR  
E-mail: quim@quimica.ufpr.br

**Joaquim Jose Soares Neto**  
Universidade de Brasília  
E-mail: neto@unb.br

**Jordan Del Nero**  
Departamento de Física—UFPE  
E-mail: jordan@df.ufpe.br

**Jorge Freire de Queiroz**  
UFF-IQ-Depto de Química Inorgânica  
Outeiro de São João Batista, s/n  
24020-150 Niterói—RJ  
E-mail: walk@kabir.gqt.uff.br

**Jorge Luiz Neves**  
Universidade Federal de Minas Gerais  
E-mail: jorge@rubidio.qui.ufmg.br

## LIST OF PARTICIPANTS

**Jose Carlos de Freitas Paula**  
DQF/UFPE  
E-mail: jose.carlos@dqfex.ufpe.br

**José Ciriaco Pinheiro**  
Universidade Federal do Pará  
E-mail: ciriaco@ufpa.br

**Jose David M. Vianna**  
IF—UnB & DF—UFSCar  
E-mail: david@ufba.br

**Jose Jair Vianna Cirino**  
Universidade Federal de Juiz de Fora  
E-mail: jair@canada.com

**José Luis Marin Flores**  
Departamento de Investigación en Física  
Universidade de Sonora  
Apdo. Postal A-088, Código Postal 83000  
Hermosillo, Sonora, México  
E-mail: jmarin@cajeme.cifus.uson.mx

**José Luis Paz**  
Universidade Simon Bolivar, Departamento  
de Química, Apartado 89000, Caracas  
1080A, Venezuela  
E-mail: jlpaz@usb.vc

**José Manuel Riveros**  
Instituto de Química, USP  
E-mail: jmrnigra@iq.usp.br

**Jose Maria Pires**  
Universidade Federal do Espírito Santo  
E-mail: josempires@escelsa.com.br

**José Rachid Mohallem**  
Universidade Federal de Minas Gerais  
E-mail: rachid@fisica.ufmg.br

**Jose Roberto dos Santos Politi**  
UnB  
E-mail: politi@unb.br

**Jose Roberto Ruggiero**  
Ibilce—UNESP  
E-mail: zerug@df.ibilce.unesp.br

**Jose Walkimar de Mesquita Carneiro**  
Universidade Federal Fluminense  
E-mail: walk@kabir.gqt.uff.br

**Josefredo Rodriguez Pliego Jr.**  
Universidade de São Paulo  
E-mail: josef@iq.usp.br

**Josiana Garcia de Araujo**  
Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de  
Ribeirao Preto—Universidade de São Paulo  
E-mail: josi@zipmail.com.br

**Juan Andrés**  
Universitat Jaume I—Castelló—España  
E-mail: andres@uji.es

**Julieta Izuru Yasuda**  
Universidade Federal do Amazonas  
E-mail: ajose9599@yahoo.com

**Julio Ricardo Sambrano**  
Unesp/Bauru  
E-mail: sambrano@fc.unesp.br

**Kaline Coutinho**  
Universidade de Mogi das Cruzes  
E-mail: kaline@umc.br

**Karina Shimizu**  
Instituto de Química—USP  
E-mail: kshimizu@iq.usp.br

**Kathia Maria Honorio**  
IQSC-USP  
E-mail: kathia@iqsc.sc.usp.br

**Katia Julia de Almeida**  
UFMG  
E-mail: julia@elysium.qui.ufmg.br

**Kátia Zaccur Leal**  
Universidade Federal Fluminense  
E-mail: kzl@rmn.uff.br

**Kelson Mota Teixeira de Oliveira**  
Universidade do Amazonas  
E-mail: quakel@iqsc.sc.usp.br

**Kleber Carlos Mundim**  
Instituto de Química—Universidade de  
Brasília  
E-mail: kcmundim@unb.br

**Laurent Emmanuel Dardenne**  
Laboratorio Nacional de Computacao  
Cientifica—LNCC  
E-mail: dardenne@lncc.br

**Lauro Camargo Dias Junior**  
Universidade Federal do Parana  
E-mail: laurocd@quimica.ufpr.br



**Leandro Alves Rezende**  
Departamento de Física, Universidade  
Federal de Juiz de Fora  
E-mail: leandro@fisica.ufjf.br

**Leandro Greff da Silveira**  
IQ-UFRGS  
E-mail: leandrogreff@zipmail.com.br

**Leandro Martines**  
IQ/UNICAMP  
E-mail: lmarines@altavista.com

**Leandro Martinez**  
Universidade Estadual de Campinas  
E-mail: lmartinez@altavista.com

**Lee Mu-Tao**  
Departamento de Química, Universidade  
Federal de São Carlos  
E-mail: dlmt@power.ufscar.br

**Leo Degreve**  
USP  
E-mail: leo@obelix.ffclrp.usp.br

**Leonardo Bruno Assis Oliveira**  
Universidade Federal Goiás  
E-mail: leob@fis.ufg.br

**Leonardo Tsuyoshi Ueno**  
Instituto de Química—USP  
E-mail: tsuyoshi@iq.usp.br

**Leticia Raquel Moreira Teixeira**  
Unicentro Newton Paiva  
E-mail: leticianteixeira@hotmail.com

**Levi Gonçalves dos Santos**  
Universidade de São Paulo  
E-mail: levigs@iq.usp.br

**Li Exequiel Espinola Lopez**  
Universidade de Brasília (UnB)  
E-mail: espinola@fis.unb.br

**Li Exequiel Espinola López**  
Universidade de Brasília  
E-mail: espinola@fis.unb.br

**Lilian Weitzel Coelho Paes**  
UFRJ  
E-mail: plpaes@iq.ufrj.br

**Louraine Claudia de Melo**  
Departamento de Física, Universidade  
Federal de Juiz de Fora  
E-mail: loraine@fisica.ufjf.br

**Luciana Jansen de Oliveira Figueiredo**  
FIOCRUZ  
E-mail: lujof@ig.com.br

**Luciano Conti**  
Universidade Federal do Espírito Santo  
E-mail: qpaulada@bol.com.br

**Luciano Emerich Faria**  
Depto. de Química—ICEX—UFMG  
E-mail: lucfaria@dedalus.lcc.ufmg.br

**Luciano Nassif Vidal**  
UNICAMP  
E-mail: lnvidal@iqm.unicamp.br

**Luciano Tavares da Costa**  
Engenharia Química, UFBA  
E-mail: ltcfba@yahoo.com.br

**Luciene Borges Silva**  
FFCLRP—USP  
E-mail: lubosi@uol.com.br

**Lucimara Ramos Martins**  
Instituto de Química—Unicamp  
E-mail: lucimara@iqm.unicamp.br

**Luis Antonio da Silva Vasconcellos**  
UNESP-FC-Dept. Matemática—Bauru—SP  
E-mail: toninho@fc.unesp.br

**Luis Henrique Wasilewski**  
Universidade Estadual de Campinas  
E-mail: wasilews@uol.com.br

**Luiz Antonio Sodre Costa**  
UFMG  
E-mail: lrcosta@netuno.qui.ufmg.br

**Luiz Augusto Gesteira de Souza**  
Instituto de Química—USP  
E-mail: lagusto@iq.usp.br

**Luiz A. C. Malbouisson**  
Instituto de Física da UFBA, Salvador, Bahia  
E-mail: lmalboui@ufba.br

**Luiz Carlos Gomide Freitas**  
Departamento de Química—Universidade  
Federal de São Carlos  
E-mail: gomide@qt.dq.ufscar.br

**Luiz E. R. Cordeiro**  
IQ UNICAMP  
E-mail: cordeiro@iqm.unicamp.br

## LIST OF PARTICIPANTS

**Luiz Eugenio Machado**  
Departamento de Física—UFSCar  
E-mail: mlima@dq.ufscar.br

**Luiz Eugênio Machado**  
Departamento de Física, Universidade  
Federal de São Carlos  
E-mail: dlem@power.ufscar.br

**Luiz Felipe de Souza Coelho**  
Instituto de Física—UFRJ  
E-mail: coelho@if.ufrj.br

**Luiz Guilherme Machado de Macedo**  
IQSC/USP  
E-mail: chemkid@iqsc.sc.usp.br

**Luiz Marco Brescansin**  
Instituto de Física Gleb-Wataghin,  
Universidade Estadual de Campinas  
E-mail: bresca@ifi.unicamp.br

**Luiz Roberto Marim**  
ITA  
E-mail: ruv@uol.com.br

**Maira de Almeida Carvalho**  
UFPE  
E-mail: mairacarvalho@hotmail.com

**Manoel Gustavo Petrucelli Homem**  
UFSCar  
E-mail: pmanoel@iris.ufscar.br

**Manuel Costa**  
Universidade do Porto  
E-mail: manuel@bol.com.pt

**Manuel F. Ruiz-López**  
Laboratoire de Chimie Theorique, CNRS-  
UHP, Université Henri Poincaré, Nancy,  
France  
E-mail: Manuel.Ruiz@lctn.uhp-nancy.fr

**Marçal de Oliveira Neto**  
UnB  
E-mail: marcal@unb.br

**Marcello Ferreira da Costa**  
IQUSP-SP  
E-mail: mcosta@iq.usp.br

**Marcelo Andres Fossey**  
UNESP  
E-mail: marcelofossey@bol.com.br

**Marcelo de Freitas Lima**  
Universidade Federal de São Carlos  
E-mail: mlima@dq.ufscar.br

**Marcelo Zaldini Hernandes**  
Universidade Federal de Pernambuco—  
UFPE  
E-mail: zaldini@npd.ufpe.br

**Marcia Barsottelli Procopio**  
UFMG  
E-mail: procopio@zeus.qui.ufmg.br

**Marcia Miguel Castro Ferreira**  
Instituto de Química, UNICAMP, Campinas  
E-mail: marcia@iqm.unicamp.br

**Marcio de Oliveira Martins**  
DFQ/IQ/UFRJ  
E-mail: marc.mart@uol.com.br

**Marcio Henrique Franco Bettega**  
Universidade Federal do Parana  
E-mail: bettega@fisica.ufpr.br

**Marcio Jose Estillac de Mello Cardoso**  
Departamento de fisico-Qimica/IQ/UFRJ  
E-mail: marcio@iq.ufrj.br

**Marcio Marques Martins**  
IQ-UFRGS  
E-mail: marciomm@iq.ufrgs.br

**Marcio Martins**  
GQT-UFRGS  
E-mail: marciomm@iq.ufrgs.br

**Marcio Soares Pereira**  
DFQ-IQ-UFRJ  
E-mail: marcio@chaer.iq.ufrj.br

**Marco Antonio Chaer Nascimento**  
Instituto de Química da UFRJ  
E-mail: chaer@iq.ufrj.br

**Marcos Antonio de Castro**  
Universidade Federal de Goiás  
E-mail: mcastro@fis.ufg.br

**Marcos Antonio De Oliveira**  
UFMG  
E-mail: oliveira@netuno.qui.ufmg.br

**Marcos Roberto Lourenzoni**  
Universidade de São Paulo—Faculdade de  
Filosofia Ciências e Letras de Ribeirao Preto  
E-mail: lourenzoni@mailcity.com

**Marcos Roberto Ribas**  
UFPR  
E-mail: grey2099@quimica.ufpr.br

**Marcos Serrou do Amaral**  
Universidade de São Paulo/Instituto de Física  
E-mail: msamaral@usp.br

**Maria Aparecida da Silva Prado**  
IQ-UNB  
E-mail: maprado@unb.br

**Maria Cristina Andrezza Costa**  
UNICAMP  
E-mail: cristina@iqm.unicamp.br

**Maria Cristina Andreolli Lopes**  
Universidade Federal de Juiz de Fora  
E-mail: criss@fisica.ufjf.br

**Maria Cristina Rodrigues da Silva**  
DFQ/IQ/UFRJ  
E-mail: mcrcsilva@iq.ufrj.br

**Maria das Graças Reis Martins**  
Depto. Física—UFSCar  
E-mail: mgraca@df.ufscar.br

**Maria Oswald Machado de Matos**  
Departamentode Física, PUC-Rio  
E-mail: mmatos@fis.puc-rio.br

**Maria Suely Pedrosa Mundim**  
Instituto de Física—UnB  
E-mail: spedrosa@unb.br

**Maria Teresa P. Gambardella**  
IQSC—USP—São Carlos  
E-mail: teca@iqsc.sc.usp.br

**Mariana G. Vazquez**  
UNESP  
E-mail: marianavazquez@bol.com.br

**Mariano Galvagno**  
University of Buenos Aires  
E-mail: galvagno@speedy.cnea.gov.ar

**Marina Pelegrini**  
Instituto Tecnológico de Aeronáutica  
E-mail: marinape@ief.ita.cta.br

**Mario Barbatti**  
IQ-UFRJ  
E-mail: mbarbatti@if.ufrj.br

**Mario Cesar Barbatti**  
IQ-UFRJ  
E-mail: barbatti@if.ufrj.br

**Mario Ramos da Silva Junior**  
Universidade Federal de Pernambuco  
E-mail: mario.korn@dqfex.ufpe.br

**Martha Teixeira de Araujo**  
Dept. Físico-Química-Inst. de Química-UFF  
E-mail: martha@gfq.uff.br

**Mary C. Salazar**  
Universidade Simon Bolivar  
E-mail: mcsalazar@cantv.net

**Mauricio dos Santos Matos**  
Instituto de Química—Universidade Federal de Uberlândia  
E-mail: maumatos@hotmail.com

**Mauricio Ruv Lemes**  
ITA  
E-mail: ruv@uol.com.br

**Mauro Barbosa de Amorim**  
Universidade Federal do Rio de Janeiro  
E-mail: mauro@qt.dq.ufscar.br

**Mauro dos Santos de Carvalho**  
UFLA  
E-mail: mauro@chaer.iq.ufrj.br

**Melissa Fabiola Siqueira Pinto**  
IQSC-USP  
E-mail: melissa@iqsc.sc.usp.br

**Michel Loos**  
IQ-USP  
E-mail: loos@usp.br

**Milan Trsic**  
IQSC/USP  
E-mail: milan@iqsc.sc.usp.br

**Milton Massumi Fujimoto**  
Universidade Federal do Parana  
E-mail: milton@fisica.ufpr.br

**Milton Taidi Sonoda**  
Instituto de Química—UNICAMP  
E-mail: msonoda@iqm.unicamp.br

**Moacyr Comar Junior**  
Instituto de Química de São Carlos  
E-mail: moacyr@iqsc.sc.usp.br

## LIST OF PARTICIPANTS

### **Mozart Neves Ramos**

UFPE

E-mail: mramos@npd.ufpe.br

### **Mozart Pimentel Montenegro de Barros**

Universidade Federal de Pernambuco

E-mail: mozart@dqfex.ufpe.br

### **Munir S. Skaf**

Instituto de Química—UNICAMP

E-mail: skaf@iqm.unicamp.br

### **Myriam Giambiagi**

CBPF

E-mail: rio@cbpf.br

### **Nei Marcal**

UNICAMP

E-mail: marcal@ifi.unicamp.br

### **Nelson Henrique Morgon**

IQ-UNICAMP

E-mail: morgon@iqm.unicamp.br

### **Nelson Velho de Castro Faria**

Instituto de Física/UFRJ

E-mail: faria@if.ufrj.br

### **Ney Henrique Moreira**

IQ/UNICAMP

E-mail: ney@iqm.unicamp.br

### **Nivan Bezerra da Costa Junior**

UFS

E-mail: nbcj@ufs.br

### **Noah Gresh**

France

### **Noriberto Araujo Pradie**

Instituto de Química—USP

E-mail: noribert@iq.usp.br

### **Odonório Abrahão Júnior**

Universidade de Uberlândia

E-mail: odonirio@ufu.br

### **Orlando Roberto Neto**

Instituto de Estudos Avançados

E-mail: orlando@ieav.cta.br

### **Orlando Tapia**

Department of Physical Chemistry, Uppsala  
University, Uppsala, Sweden

E-mail: orlando.tapia@fki.uu.se

### **Oscar Malta**

Departamento de Química Fundamental,  
UFPE, Recife, PE, 50670-901, Brasil

E-mail: omlm@npd.ufpe.br

### **Pablo Jaque**

Pontificia Universidad Católica de Chile,  
Chile

E-mail: pjaque@puc.cl

### **Patrick J. O'Malley**

Department of Chemistry, University of  
Manchester Institute of Science and  
Technology, Manchester, U.K.

E-mail: patrick.o'malley@umist.ac.uk

### **Paulo Belletato**

Departamento de Física, ICE, Universidade  
Federal de Juiz de Fora

E-mail: belletato@fisica.ufjf.br

### **Paulo Roberto Livotto**

Instituto de Química—UFRGS

E-mail: Livotto@iq.ufrgs.br

### **Paula Homem de Mello**

IQSC/USP

E-mail: paulahm@iqsc.sc.usp.br

### **Paulo Augusto Netz**

IQ/ULBRA e IF/UFRGS

E-mail: netz@if.ufrgs.br

### **Paulo Cesar Piquini**

Universidade Federal de Santa Maria

E-mail: ppiquini@ccne.ufsm.br

### **Paulo Fernando Goncalves**

Instituto de Química—UFRGS

E-mail: paulo@iq.ufrgs.br

### **Paulo Gustavo Barboni Dantas Nascimento**

Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de  
Ribeirão Preto—USP

E-mail: pbarboni@usp.br

### **Paulo Henrique A. Guimaraes**

UnB

E-mail: pauloh@fis.unb.br

### **Paulo Henrique Ribeiro Peixoto**

UFPE

E-mail: pauloh@df.ufpe.br

### **Paulo Monteiro Vieira Braga Barone**

Departamento de Física, Universidade  
Federal de Juiz de Fora

E-mail: barone@fisica.ufjf.br

**Paulo Roberto Librelon**

UFES

E-mail: plibrelon@ig.com.br

**Paulo Roberto Pinto**

Universidade Federal de São Carlos

E-mail: pinto@dq.ufscar.br

**Pedro A. M. Vazquez**

IQ UNICAMP

E-mail: vazquez@iqm.unicamp.br

**Pedro Alexandre de Araujo Gomes Lapido Loureiro**

Instituto de Biofísica—UFRJ

E-mail: paloureiro@biof.ufrj.br

**Pedro Geraldo Pascutti**

UFRJ

E-mail: pascutti@biof.ufrj.br

**Peter Rudolf Seidl**

Escola de Química—UFRJ

E-mail: pseidl@uol.com.br

**Priscila Tabita do Amorim**

Universidade Federal do Parana

E-mail: priscila@quimica.ufpr.br

**Raphael da Costa Cruz**

Universidade Federal do Rio de Janeiro

E-mail: rdccruz@ufrj.br

**Raquel Ferreira dos Santos**

Universidade Federal de Goiás

E-mail: raquel@quimica.ufg.br

**Raúl Riera Aroche**Departamento de Investigación en Física,  
Universidade de Sonora, Mexico

E-mail: rriera@cajeme.cifus.uson.mx

**Regiane de Cassia Maritan Ugulino de Araujo**

UFPB

E-mail: regiane@quimica.ufpb.br

**Reinaldo Centoducatte**

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

E-mail: reinaldo@cce.ufes.br

**Renato Carlos Tonin Ghiotto**

Faculdade de Ciências—Unesp—Bauru

E-mail: raonighiotto@uol.com.br

**Renato Luis Tame Parreira**Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de  
Ribeirão Preto—USP

E-mail: rtame@usp.br

**Renato Medeiros**

Universidade Católica de Goiás

E-mail: renatoucg@bol.com.br

**Renato Rosseto**

UNICAMP

E-mail: rrosseto@iqm.unicamp.br

**Ricardo Aroca**

Department of Chemistry and

Biochemistry and

School of Physics, University of Windsor

Windsor, Ontario, Canada

E-mail: g57@uwindsor.ca

**Ricardo Bicca de Alencastro**

Instituto de Química da Universidade

Federal do Rio de Janeiro

E-mail: bicca@iq.ufrj.br

**Ricardo Gargano**

UnB

E-mail: gargano@fis.unb.br

**Ricardo Luiz Longo**

Departamento de Química Fundamental—

Universidade Federal de Pernambuco

E-mail: longo@npd.ufpe.br

**Ricardo Mercadante**

Universidade Estadual do Oeste do Parana

E-mail: ricardomercadante@hotmail.com

**Ricardo Oliveira Freire**

UFS

E-mail: freire@infonet.com.br

**Ricardo Vessecchi Lourenço**USP—Faculdade de Filosofia Ciências e  
Letras de Ribeirão Preto

E-mail: ricardo@asterix.ffclrp.usp.br

**Roberto Luiz Andrade Haiduke**

Universidade Estadual de Campinas

(UNICAMP)

E-mail: haiduke@iqm.unicamp.br

**Roberto Pereira Santos**

Universidade Estacio de Sa

E-mail: robertop@acd.ufrj.br

**Roberto Rivelino Melo Moreno**

IF-USP

E-mail: rivelino@if.usp.br

**Roberto Rodrigues Coelho**

CENTRO DE TECNOLOGIA MINERAL

E-mail: coelho@cetem.gov.br

## LIST OF PARTICIPANTS

### **Rodrigo da Silva Bitzer**

DFQ-IQ/UFRJ

E-mail: rodrigo@chaer.iq.ufrj.br

### **Rodrigo Meneghetti Pontes**

Universidade Estadual de Maringa

E-mail: rodrigomeneghetti@yahoo.com.br

### **Rodrigo Sebastian Iglesias**

UFRGS

E-mail: rodrigo@iq.ufrgs.br

### **Rodrigo Skinner**

Instituto de Química/UFRJ

E-mail: rskinner@ig.com.br

### **Rogério Araujo Lordeiro**

UFMG

E-mail: rogerio@platina.qui.ufmg.br

### **Rogério Custodio**

Instituto de Química—Unicamp

E-mail: roger@iqm.unicamp.br

### **Romarly Fernandes da Costa**

Unicamp

E-mail: roma@ifi.unicamp.br

### **Ronaldo Castro Silva**

EQ/UFRJ

E-mail: ronaldo@stargateway.com.br

### **Ronaldo Giro**

IFGW - UNICAMP

E-mail: giro@ifi.unicamp.br

### **Roy Edward Bruns**

Unicamp

E-mail: bruns@iqm.unicamp.br

### **Rudolf Kiralj**

Instituto de Química, UNICAMP, Campinas

E-mail: rudolf@iqm.unicamp.br

### **Rugles Cesar Barbosa**

IQSC

E-mail: rugles@iqsc.sc.usp.br

### **Sabrina Thais Broggio**

IBILCE—UNESP

E-mail: sabroggio@bol.com.br

### **Sayuri Okamoto**

UNICAMP

E-mail: sayuri@iqm.unicamp.br

### **Scheila Furtado Braga**

UNICAMP

E-mail: scheila@ifi.unicamp.br

### **Sebastiao Claudino da Silva**

Universidade Federal de Mato Grosso

E-mail: sc\_silva@terra.com.br

### **Sérgio de Paula Machado**

Instituto de química da UFRJ

E-mail: sergiopm@iq.ufrj.br

### **Sergio Eduardo Michelin**

UFSC

E-mail: fsc1sem@fsc.ufsc.br

### **Sergio Emanuel Galembeck**

FFCLRP-USP

E-mail: segalemb@usp.br

### **Sérgio Modesto Vechi**

UNICAMP

E-mail: smv@iqm.unicamp.br

### **Sidney Jurado de Carvalho**

UNESP/Bauru

E-mail: carvalho@fc.unesp.br

### **Sidney Ramos de Santana**

LQTC—DQF—CCEN—UFPE

E-mail: magneticdolphin@yahoo.com

### **Silvana Guilardi**

IQ/Universidade Federal de Uberlandia

E-mail: silvana@ufu.br

### **Silvana Mattedi**

UFSCAR/UFBA

E-mail: silvana@ufba.br

### **Silvania Maria de Oliveira**

Universidade Federal de Pernambuco

E-mail: smo72@bol.com.br

### **Silvânia Maria de Oliveira**

UFPE

E-mail: SMO72@BOL.COM.BR

### **Socrates de Oliveira Dantas**

Departamento de Física, Universidade

Federal de Juiz de Fora

E-mail: dantas@fisica.ufjf.br

### **Solange Binotto Fagan**

UFMS-RS

E-mail: solange@pgfis.ccne.ufsm.br

### **Stella Maris Resende**

USP

E-mail: stella@iq.usp.br

**Sylvio Canuto**

Instituto de Física, Universidade de São Paulo  
E-mail: canuto@if.usp.br

**Tarcisio Marciano da Rocha Filho**

IF—Universidade de Brasília  
E-mail: marciano@fis.unb.br

**Tatiane Martins Lobo**

Universidade Federal de Goiás  
E-mail: silvio@quimica.ufg.br

**Tayra Acher**

Centro de Tecnologia Mineral  
E-mail: tayra@cetem.gov.br

**Teodorico de Castro Ramalho**

IME  
E-mail: teo@epq.ime.eb.br

**Tereza Pereira de Souza**

IBILCE-UNESP  
E-mail: phatus@bol.com.br

**Tertius Lima da Fonseca**

Universidade Federal de Goiás  
E-mail: tertius@fis.ufg.br

**Thaciana Valentina Malaspina Fileti**

USP  
E-mail: thaciana@if.usp.br

**Thaís Tavares da Silva**

UFF-IQ-Depto de Química Inorgânica  
Outeiro de São João Batista, s/n  
24020-150 Niterói—RJ  
E-mail: walk@kabir.gqt.uff.br

**Thereza Amelia Soares**

Laboratorium fuer Physicalische Chemie  
E-mail: tsoares@igc.phys.chem.ethz.ch

**Valdemir Ludwig**

IF-USP  
E-mail: ludwig@macbeth.if.usp.br

**Valeria Cristina Fregati Rustici**

Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de  
Ribeirão Preto—USP  
E-mail: vrustici@usp.br

**Vicenzo Barone**

Laboratorio di Struttura e Dinamica  
Molecolare,  
Dipartimento di Chimica, Università di  
Napoli “Federico II,” Complesso  
Universitario di Monte S. Angelo, Napoli,  
Italy  
E-mail: enzo@lsdm.dichi.unina.it

**Vitor Barbanti Pereira Leite**

IBILCE—UNESP  
E-mail: vleite@df.ibilce.unesp.br

**Vitor Rafael Coluci**

Universidade Estadual de Campinas  
E-mail: coluci@ifi.unicamp.br

**Viviane Costa Felicissimo**

UFMG  
E-mail: viviane@dedalus.lcc.ufmg.br

**Vivianni Marques Leite dos Santos**

Universidade Federal de Pernambuco  
E-mail: vivianni@npd.ufpe.br

**Voner Miranda Martins**

Universidade Federal de Juiz de Fora  
E-mail: voner@acad.ufjf.br

**Wagner B. De Almeida**

Laboratório de Química Computacional e  
Modelagem Molecular (LQC-MM),  
Departamento de Química, ICEx, UFMG  
E-mail: wagner@netuno.qui.ufmg.br

**Wagner de Mendonca Faustino**

UFPE  
E-mail: wmfaustino@bol.com.br

**Wallace Duarte Fragoso**

Universidade Federal de Pernambuco  
E-mail: wallace@dqfex.ufpe.br

**Washington Barbosa da Silva**

UNB  
E-mail: barbosa@fis.unb.br

**Washington Luís Vieira da Silva**

UFPB  
E-mail: wlvs@bol.com.br

**William Ricardo Rocha**

Núcleo de Estudos em Química  
Computacional (NEQC)—Depto. Química—  
ICE—UFJF  
E-mail: wrocha@quimica.ufjf.br

## LIST OF PARTICIPANTS

**Yoshiyuki Hase**

UNICAMP

E-mail: hase@iqm.unicamp.br

**Yuji Takahata**

Universidade Estadual de Campinas

E-mail: taka@iqm.unicamp.br

**Yves G. Smeyers**

Instituto de Estructura de la Materia,

C.S.I.C., Madrid, Spain

E-mail: Smeyers@iem.cfmac.csic.es

**Zolacir Trindade de Oliveira Junior**

Depto. Física do Estado Solido—IF/UFBa

E-mail: zolacix@fis.ufba.br

**Adalberto Vieira Rocha**

IQ—UNB

E-mail: emaia@unb.br

**Alberico Borges Ferreira da Silva**

Instituto de Química de São Carlos

Departamento de Química e Física Molecular

E-mail: alberico@iqsc.sc.usp.br

**Antônio Flávio de C. Alcântara**

Universidade Federal do Amazonas

E-mail: ajose9599@yahoo.com

**Elaine Rose Maia**

IQ—UNB

E-mail: emaia@unb.br

**Mariana Barnes Small da Accelrys**

ACCELRYS

E-mail: emaia@unb.br

**Patrícia Farias**

Depto. de Química Fundamental—UFPE

Recife—PE

E-mail: pmaf@npd.ufpe.br

**Patrícia Regina Pereira Barreto**

Laboratório Associado de Plasma (LAP)

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais  
(INPE)

Av. dos Astronautas, 1758, São José dos

Campos, CP. 515, SP, 12.201-970

E-mail: patricia@plasma.inpe.br