



XII Simpósio Brasileiro

XII SBQT

de Química Teórica

ENGLISH

INÍCIO

HISTÓRICO

COMISSÃO

TÓPICOS

PROGRAMA

INFORMES

FÓRUM

INSCRIÇÕES

RESUMOS

Links

RESUMOS

RELAÇÃO DE TRABALHOS APROVADOS PARA APRESENTAÇÃO NAS SEÇÕES DE PAINÉIS DO XII SBQT.

Todos os resumos foram convertidos para o formato PDF. Para abri-los basta utilizar o [Adobe Reader](#) disponível gratuitamente na internet.

INSCRIÇÃO	TÍTULO	AUTORES
361 - 1	THEORETICAL INVESTIGATIONS ON THE ELECTRONIC STRUCTURE OF GA84-CLUSTERS	Johannes Frenzel, Sibylle Gemming, Gotthard Seifert
359 - 1	ANTIMALARIAL ACTIVITY OF SULFONAMIDES	Renato Carlos Tonin Ghiotto, Francisco Carlos Lavarda
357 - 1	A STUDY ON CHITOSAN CHARGE TRANSFER COMPLEXES USING SEMI-EMPIRICAL METHODS	Alvaro Antonio Alencar de Queiroz, Écio José França, Kleber de Arruda Almeida,
355 - 1	CÁLCULO DAS INTERAÇÕES EFETIVA E ATRAVÉS DAS LIGAÇÕES EM DERIVADOS DA N-ARIL PIPERIDINA. PROPAGAÇÃO ELETRÔNICA ATRAVÉS DE PONTES SATURADAS	Mozart Pimentel Montenegro de Barros, Alfredo Arnóbio Souza da Gama,
355 - 2	CÁLCULO DAS INTERAÇÕES EFETIVA E ATRAVÉS DAS LIGAÇÕES EM PARACICLOFANOS SUBSTITUÍDOS	Mozart Pimentel Montenegro de Barros, Alfredo Arnóbio Souza da Gama,
354 - 1	FREQUÊNCIA DE ESTIRAMENTO V(NC) EM COMPLEXOS [RU(NH3)5(NC-R)]N+ (R=H,-CH3,-CH2CH3,-CH2C(O)OH; N=2 E 3) UMA COMPARAÇÃO ENTRE OS VALORES TEÓRICOS E EXPERIMENTAIS	Franciscarlos Veras Cardoso, Hildo Antonio dos Santos Silva, Cícero Wellington Brito Bezerra, David Lima Azevedo, Joacy Batista de Lima,
353 - 1	PROPRIEDADES ELETRÔNICAS E ESTRUTURAIS DE NANOFIOS DE COBRE	Anderson da Silva Moreira, Fernando Sato, Pablo Zimmermann Coura, Douglas Soares Galvão, Sócrates de Oliveira Dantas,
352 - 1	IDENTIFICAÇÃO DA ATIVIDADE ANTITUMORAL DE ELIPTICINAS USANDO ÍNDICES ELETRÔNICOS	Louraine Cláudia de Melo, Scheila Furtado Braga, Paulo Monteiro Vieira Braga Barone,
350 - 1	THEORETICAL STUDY OF THE REACTIONS BF3+BH	Eberth de Almeida Corrêa, Ricardo Gargano, Alessandra Ferreira Albernaz Vilela, Patrícia Regina Pereira Barreto,
345 - 1	PARTIAL ATOMIC CHARGES AS THEORETICAL DESCRIPTORS IN LSER PARTITIONING STUDIES	João Pedro Simon Farah, Augusto Gouvea Dourado, Vanessa Maria Carpentieri,
344 - 1	VARIÇÕES CONFORMACIONAIS DE ELAGITANINOS	Fernando Cesário Rangel, Raquel Ferreira dos Santos, Pedro Henrique Ferri, Elaine Rose Maia,
343 - 1	CONFORMATIONAL ANALYSIS OF OMEPRAZOLE FAMILY COMPOUNDS	Aline Thaís Bruni, Albérico Borges Ferreira da Silva, Márcia Miguel Castro Ferreira, Vitor Barbanti Pereira Leite,
339 - 1	INVESTIGAÇÃO DO MECANISMO DE ENCAIXE INDUZIDO E DA ATIVIDADE CATALÍTICA DA PROTEASE DO CITOMEGALOVIRUS HUMANO	César Augusto Fernandes de Oliveira, Cristiano Ruch Werneck Guimarães, Gabriela Barreiro, Ricardo Bicca de Alencastro,
339 - 2	DENDRÍMEROS NA LIBERAÇÃO CONTROLADA DE DROGAS: ESTUDO DE DINÂMICA MOLECULAR	Edson R. A. Oliveira, César Augusto Fernandes de Oliveira, Vanessa L. R. Furtado, Ricardo Bicca de Alencastro,

338 - 1	SOLVATAÇÃO DE ETER COROÁ EM ÁGUA E SOLUÇÃO AQUOSA DE AZIDA DE SÓDIO	Mayal Simas, Willian Ricardo Rocha,
337 - 1	ELECTRONIC SPETRA AND STRUCTURE OF THE ION [RUCL5NO]2-	Sebastiao Claudino da Silva, Francisco Bolivar Correto Machado,
337 - 2	ANALISE DFT DOS IONS [(NH3)5RU-PIRAZINA-RU (NH3)5]5+ E [(NH3)5RU-4-4BIPYRIDINA-RU(NH3)5]5+	Sebastiao Claudino da Silva, Francisco Bolivar Correto Machado,
336 - 1	OXIDAÇÃO DE SULFETOS POR COMPOSTOS DE COORDENAÇÃO OXO-DIPEROXO DE MOLIBDÊNIO QUIRAIS	Juliana Angeiras Batista da Silva, Ricardo Luiz Longo,
335 - 1	ESTUDO TEÓRICO DO ESPECTRO VIBRACIONAL DA CAULINITA	João Batista Lopes Martins, Elton Anderson Santos de Castro,
334 - 1	MODELO MOLECULAR PARA O MAGNETISMO NO FERRO	José Ribamar da Silva Santos, Antonio Carlos Pavão,
332 - 1	DETERMINAÇÃO SEMI-EMPÍRICA DE ÁGUA COORDENADA EM COMPLEXOS DE EURÓPIO (III)	Rodrigo Queiroz de Albuquerque, Ricardo oliveira Freire,
332 - 2	ESTUDO DA COVALÊNCIA DE MOLÉCULAS DIATÔMICAS E COMPLEXOS DE EURÓPIO(III) UTILIZANDO O CONCEITO DE POLARIZABILIDADE DA REGIÃO DE RECOBRIMENTO	Rodrigo Queiroz de Albuquerque, Oscar Manoel Loureiro Malta,
330 - 1	CÁLCULOS AB INITIO DAS PROPRIEDADES FOTOLUMINESCENTES DO TITANATO DE ESTRÔNCIO COM DEFICIÊNCIA DE SRO	Marcos Anicete dos Santos, Emmanuelle Orhan, Carlos Davidson Pinheiro, Maria Fernanda do Carmo Gurgel, Elson Longo, Armando Beltrán, Juan Andrés, Fenelon Martinho Lima Pontes, Paulo Sérgio Pizani,
330 - 2	PIGMENTOS DE ALUMINA/FERRO: ANÁLISES MECÂNICO QUÂNTICA E EXPERIMENTAL	Renata Cristina Lima, Marcos Anicete dos Santos, Maria Fernanda do Carmo Gurgel, Elson Longo, Edson Roberto Leite, Fenelon Martinho Lima Pontes, Paulo Sérgio Pizani,
329 - 1	MÉTODO MECÂNICO-QUÂNTICO PERIÓDICO PARA O ESTUDO DO BATIO3 DOPADO COM NI PARA APLICAÇÃO COMO PIGMENTO	Alessandra Zenatti, Graziela Pereira Casali, Paulo Sérgio Pizani, Maria Fernanda Carmo Gurgel, Edson Roberto Leite, Elson Longo, José Arana Varela,
329 - 2	ESTUDO MECÂNICO QUÂNTICO DAS PROPRIEDADES FOTOLUMINESCENTES DO ESPINÉLIO LI2ZNTI3O8	Maria Fernanda do Carmo Gurgel, Maria Sueli Costa de Câmara, Sérgio Ricardo de Lazaro, Edson Roberto Leite, Elson Longo, Armando Beltran,
328 - 1	ESTUDO QSAR DE ANALOGOS DE NEOLIGNANAS 8.O.4' COM ATIVIDADE LESHMANICIDA	Sergio Roberto Romeiro de Aguiar, Rosivaldo dos Santos Borges, Cláudio Nahum Alves,
327 - 1	ESTUDO TEÓRICO DA REATIVIDADE DE DERIVADOS DIMETILADOS DA N-ACETIL-P-BENZOQUINONA IMINA COM NUCLEÓFILOS	Cláudio Nahum Alves, Rosivaldo dos Santos Borges,
325 - 1	DEPOSIÇÃO DE OURO SOBRE FILMES DE POLI-PARA-FÊNILENO DE VINILA (PPV): SIMULAÇÕES DE DINÂMICA MOLECULAR	Douglas Soares Galvão, Ronaldo Giro, Segio Benites Legoas,
323 - 1	UNIVERSAL BASIS SETS FOR LOW-LYING EXCITED STATES OF POSITIVE AND NEGATIVE IONS	Cezar Laurence Barros, Francisco Elias Jorge,
322 - 1	ESTUDO DE ESTRUTURA-ATIVIDADE DAS TETRACICLINAS E PROPOSTA DE NOVOS DERIVADOS	Fernando Sato, Scheila Furtado Braga, Hélio F. dos Santos, Douglas Soares Galvão,
322 - 2	INVESTIGAÇÃO DA ATIVIDADE CARCINOGENICA DOS HIDROCARBONETOS AROMÁTICOS POLICÍCLICOS ATRAVÉS DE DESCRITORES TEÓRICOS	Karla Souza Troche, Scheila Furtado Braga, Vitor Rafael Coluci, Douglas Soares Galvão,
320 - 1	ESTUDO DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS E ESTRUTURAIS DOS LÍQUIDOS ETILENO GLICOL E GLICEROL	Aparecido de Arruda Sobrinho, Luiz Carlos Gomide Freitas,
319 - 1	ESPALHAMENTO ELÁSTICO ELÉTRON-H2O COM INCLUSÃO DA CORRELAÇÃO ELETRÔNICA DO ALVO	Maria das Graças Reis Martins, José David M. Vianna, Angelo Marconi Maniero, Luiz Eugênio Machado,
318 - 1	INCLUSÃO DOS EFEITOS DE CORRELAÇÃO ELETRÔNICA DO ALVO NO ESPALHAMENTO ELÁSTICO DE ELÉTRONS POR OZÔNIO	José David M. Vianna, Maria das Graças Reis Martins, Angelo Marconi Maniero, Luiz Eugênio Machado, Luiz Eugênio Machado,
317 - 1	SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DO ESPALHAMENTO DE LUZ DESPOLARIZADO RAYLEIGH DA MISTURA LÍQUIDA CS2/C6H6	Hubert Stassen, Silvia Dani,

315 - 1	ESTRUTURA ELETRÔNICA E INTERAÇÕES HIPERFINAS NO RADICAL (CO₂)- NA CARBOAPATITA TIPO-B IRRADIADA	Patricia Granzotto Antunes, Joice Terra, Diana Guenzburger,
313 - 1	ANÁLISE ESTRUTURAL DA MODELAGEM DA FORMAÇÃO DE CLATRATOS UTILIZANDO DINÂMICA MOLECULAR	Mauro dos Santos de Carvalho,
312 - 1	INTERAÇÕES ENTRE MEMBRANAS	Augusto Agostinho Neto, Elsoi Drigo Filho,
311 - 1	OXIDAÇÃO MEDIADA POR PEROXOS METÁLICOS VIA TEORIA DE CATÁSTROFE E FUNÇÃO DE LOCALIZAÇÃO ELETRÔNICA	Fabricio Ronil Sensato, Rogério Custodio, Slawomir Berski, Vicent Sixte Safont, Juan Andres,
309 - 1	ESTUDO TEÓRICO E COMPUTACIONAL DAS VIBRAÇÕES NORMAIS NO ESTADO SÓLIDO DO HIDRÓXIDO DE CÁLCIO	Yoshiyuki Hase,
307 - 1	USO DO MÉTODO DE TOPLISS MODIFICADO PARA PREDIZER A ATIVIDADE INIBITÓRIA DA CICLOOXIGENASE TIPO 2	Marcelo Lazzarotto, Berenice da Silva Junkes, Vilma Edite Fonseca Heinzen, Rosendo Augusto Yunes,
307 - 2	APLICAÇÃO DO ÍNDICE SEMI-EMPÍRICO TOPOIÓGICO (JET) EM ESTUDOS DE QSAR DE ÁLCOOIS ALIFÁTICOS	Berenice da Silva Junkes, Marcelo Lazzarotto, Rosendo Augusto Yunes, Vilma Edite Fonseca Heinzen,
306 - 1	ESTUDO TEÓRICO DE MISTURAS LÍQUIDAS DE DIÓXIDO DE CARBONO EM BENZENO E HEXAFLUORBENZENO	Raquel da Silva Leviski, Hubert Karl Stassen,
305 - 1	MODELO DE CLUSTER PARA SUPERCONDUTORES 123	Antonio Carlos Pavão, Jorge Alberto Manso Raimundo da Rocha,
299 - 1	BAND GAP ENGINEERING FOR POLY(P-PHENYLENE) AND POLY(P-PHENYLENEVINYLENE) COPOLYMERS USING TIGHT-BINDING APPROACH	Ronaldo Giro, Marília Junqueira Caldas, Douglas Soares Galvão,
299 - 2	MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS OF C60 NANOBEARINGS	Ronaldo Giro, Sergio B. Legoas, Douglas Soares Galvão,
298 - 1	DFT STUDY OF THE ADSORPTION OF FORMALDEHYDE ON PD4 CLUSTERS	José Walkimar de Mesquita Carneiro, Maurício Tavares de Macedo Cruz,
297 - 1	ADSORPTION OF GOLD ON CARBON NANOTUBES	José Carrijo de Faria Júnior, Mariana R. Carvalho, Antônio José Roque da Silva, Edison Zacarias da Silva, Adalberto Fazzio,
296 - 1	INVESTIGATING STRUCTURAL TRANSITION OF INTERMEDIATE SILICON CLUSTERS	Luiz Roberto Marim, Maurício Ruv Lemes, Arnaldo Dal Pino Júnior,
296 - 2	USING ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS TO SOLVE DENSITY FUNCTION MODEL EQUATION	Luiz Roberto Marim, Maurício Ruv Lemes, Arnaldo Dal Pino Júnior, Bruno Wernek,
294 - 1	MODELAGEM DO COMPORTAMENTO REOLÓGICO DE SOLUÇÕES POLIMÉRICAS NÃO-NEWTONIANAS	Raphael da Costa Cruz, Rosana Janot Martins, Márcio José Estillac de Mello Cardoso, Oswaldo Esteves Barcia,
293 - 1	RELATIVISTIC EFFECTS ON NONCLASSICAL [HG(CO)₂]₂⁺	Luiz Guilherme Machado de Macedo, Jacek Styszynski,
292 - 1	ESTUDO TEÓRICO DO EFEITO PIEZOELÉTRICO DA PEROVSKITA (BATIO₃)	Oswaldo Treu Filho, José Ciriaco Pinheiro, Rogério Toshiako Kondo,
291 - 1	GERAÇÃO DE REPRESENTAÇÕES DA VARIÁVEL DISCRETA OTIMIZADAS PARA A SOLUÇÃO DE PROBLEMAS MULTIDIMENSIONAIS	Lucas Resende Salviano, Joaquim José Soares Neto,
290 - 1	THEORETICAL PHOTO-ELECTRONIC AND PHOTO-IONISATION VIBRATIONAL RESOLVED SPECTRA OF NI₂- AND NI₂ SPECTRA USING TDPT	Freddy Fernandes Guimaraes, Amary Cesar Ferreira,
288 - 1	MD STUDY OF 1-BUTYL-3-METHYLIMIDAZOLIUM TETRAFLUOROBORATE IONIC LIQUID SOLVATION IN WATER	Carlos Eduardo Resende Prado, Luiz Carlos Gomide Freitas,
287 - 1	CÁLCULO DA FORÇA DE OSCILADOR GENERALIZADA EM EXCITAÇÕES DE CAMADA INTERNA DO BUTADIENO E DO NAFTALENO	M. Barbatti (PQ), Carlos Eduardo Bielschowsky,
286 - 1	PLANEJAMENTO TEÓRICO DE COMPOSTOS ORGANOMETÁLICOS PARA A POLIMERIZAÇÃO DE OLEFINAS: PSEUDOMETALOCENOS DE FE, TI, ZR	Willian Ricardo Rocha, Ênio Dikran Vasconcelos Bruce,
285 - 1	SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE DINÂMICA MOLECULAR DE VIDROS OXIFLUORETOS	Flavia de Souza Lins Borba, Ricardo Luiz Longo,
280 - 1	DETERMINAÇÃO DA MUDANÇA DE ENERGIA POTENCIAL INTERMOLECULAR NA MISTURA {X(H₂O)+(1-X)C₂H₅OH} USANDO O MODELO DE VAN LAAR	Roberto Pellacani Guedes Monteiro, Luciano S. Virtuoso, Luis Henrique Mendes da Silva, João Pedro Braga, João Pedro Braga,

277 - 1	MODELAGEM E ESTUDO ESPECTROSCÓPICO DO COMPLEXO [EU(DPA)3]3-	Patrícia Pereira de Lima, Gerd Bruno da Rocha, Oscar Manoel Loureiro Malta, Severino Alves Júnior,
276 - 1	ESPECTROSCOPIA DE FOTOELÉTRONS LIMIARES DO BENZENO	Cleber Dias Moreira, Helder Couto, Danilo Paiva de Almeida, Eduardo Novais de Azevedo, Marcelo Pêgo Gomes, Maria Cristina Andreolli Lopes,
276 - 2	FOTOIONIZAÇÃO LIMIAR DO BUTADIENO E DO TETRACLOROETO DE CARBONO	Helder Couto, Humberto Rojas, Eduardo Novais de Azevedo, Helen Silva, Maria Cristina Andreolli Lopes,
275 - 1	MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF H2O/CCL4 LIQUID/LIQUID INTERFACE	Ney Henrique Moreira,
272 - 1	SECÇÃO DE CHOQUE TOTAL ABSOLUTA DO 1,3-BUTADIENO NA REGIÃO DE ENERGIA DE 150 A 500 EV	Maria Cristina A. Lopes, Helder Couto, Eliane de Souza Ladislau, Helen Silva, Joelma de Oliveira Mello,
272 - 2	CONSTRUÇÃO DE UM ESPECTRÔMETRO DE FOTOELÉTRONS LIMIARES	Maria Cristina Andreolli Lopes, Helder Couto, Cleber Dias Moreira, Helen Silva, Eduardo Novais de Azevedo, Marcelo Pego Gomes,
270 - 1	DIMENSIONALIDADE E TRANSIÇÃO ESTRUTURAL NO COMPOSTO FE3O2BO3	Maria Oswald Machado de Matos, Anivaldo Xavier de Souza,
269 - 1	A STUDY OF ELECTRONIC AND STRUCTURAL PROPERTIES OF THE [CO(TPY-SH)2]	Renato Borges Pontes, Antonio Jose Roque Da Silva, Adalberto Fazzio,
268 - 1	ELECTRONIC AND STRUCTURAL PROPERTIES OF C59SI ON A HYDROGENATED SI(100) SURFACE	Ivana Zanella da Silva, Antônio José Roque da Silva, Adalberto Fazzio,
266 - 1	MOCALC: NOVO SOFTWARE DE GERENCIAMENTO DE CÁLCULO MOLECULAR	Daniela Bertolini Depizzol, Marcia Helena Moreira Paiva, Thiago Oliveira dos Santos, Anderson Coser Gaudio,
265 - 1	MP2 STUDY OF THE INTERACTION BETWEEN AMINES AND METHYL PYRUVATE	Ceciliana da Silva Braga de Oliveira, José Walkimar de Mesquita Carneiro, Fabio Barboza Passos, Donato A. G. Aranda, Octávio C. V. Antunes, Paulo Rogério N. Souza,
264 - 1	A GENERAL METHODOLOGY TO OPTIMIZE DAMPING FUNCTIONS TO ACCOUNT FOR CHARGE PENETRATION EFFECTS IN ELECTROSTATIC CALCULATIONS USING MULTICENTERED MULTIPOLAR EXPANSIONS	Araken dos Santos Werneck, Tarcísio Marciano da Rocha Filho, Laurent Emmanuel Dardenne,
263 - 1	ESTUDO TEÓRICO DA LACUNA DE ENERGIA E FENÔMENOS DE TRANSFERÊNCIA DE CARGA DO BITIOFENO	Marcos Antônio de Oliveira, Hélio Ferreira dos Santos,
261 - 1	EXCITED DOUBLET AND QUARTET STATES OF SIP: A HIGH LEVEL THEORETICAL INVESTIGATION	Fernando R. Ornellas, Levi Gonçalves dos Santos,
260 - 1	NANOPARTÍCULAS DE CDS - ESTUDO CINÉTICO E TERMODINÂMICO	Ricardo Luiz Longo, Patrícia M. A. de Farias, Beate S. Santos, Ricardo Ferreira, Frederico D. de Menezes, Carlos L. Cesar,
259 - 1	MODELAGEM DE COMPLEXOS MACROCÍCLICOS DE GD(III) USADOS COMO AGENTES DE CONTRASTES EM MRI	Gustavo Henrique Barbosa de Araujo, Cristiana Gonçalves Gameiro, Gerd Bruno Rocha, Severino Alves, Jean Dexseur,
257 - 1	TRANSFERÊNCIA DE ELÉTRONS NO PROCESSO DE ENOVELAMENTO DA POLIALANINA	Antenor Jorge Parnaíba da Silva, João Bosco Paraíso da Silva, Alfredo Arnóbio de Souza da Gama,
257 - 2	EFEITO DE MOLÉCULAS DO SOLVENTE NO CÁLCULO DE EFICIÊNCIA DE TRANSFERÊNCIA ELETRÔNICA INTRAMOLECULAR PARA PARANITROANILINA	Antenor Jorge Parnaíba da Silva, Willian Ricardo Rocha, Alfredo Arnóbio de Souza da Gama,
255 - 1	AN ACCURATE GAUSSIAN BASIS SET FOR N2, BF3 AND CO MOLECULES	Antonio Canal Neto, Reinaldo Centoducatte, Francisco Elias Jorge,
254 - 1	ESTUDO COMPARATIVO DO MODO DE INCLUSÃO DA TETRACICLINA EM CICLODEXTRINAS	Beatriz Alves Ferreira, Roberta Pereira Dias, Wagner Batista de Almeida,
254 - 2	ESTUDO DA FORMAÇÃO DE COMPLEXOS DE INCLUSÃO DE TETRACICLINAS EM BETA-CICLODEXTRINAS	Beatriz Alves Ferreira, Carla Grazielle Durães, Herick Campos Ferreira, Clébio S. N. Júnior,
	SITE SPECIFIC BOND BREAKING FOLLOWING	Maria Luiza Miranda Rocco, Gustavo Sebastian Farauto, Frederico Celestino Pontes,

251 - 1	SITE-SPECIFIC BOND-BREAKING FOLLOWING VALENCE AND CORE EXCITATIONS IN POLYMERS	Frederico Cereslino Pontes, Roberto Rosas Pinho, Marysilvia Ferreira, Gerardo Gerson Bezerra de Souza,
250 - 1	ESTUDO TEÓRICO DE REAÇÕES DE ATIVAÇÃO DE PROPANO CATALISADAS POR ZEÓLITAS	Emerson Allevato Furtado, Marco Antonio Chaer Nascimento, Edison Clemente da Silva,
249 - 1	ANÁLISE DA PRÉDISSOCIAÇÃO ACIDENTAL NO ESTADO A1SIGMA+ DA MOLÉCULA ALCALINA MISTA DE NALI	Ana Carla P. Bittencourt, Carlos Eduardo Fellows, José David M. Vianna, Frederico V. Prudente,
248 - 1	ESTUDO EXPERIMENTAL E TEÓRICO DA FOTOLUMINESCÊNCIA DE LI2TISIO5	Emmanuelle Orhan, Viviane Cristina Albarici, Elson Longo, Edson Roberto Leite, Paulo Sergio Pizani,
248 - 2	INTERPRETAÇÃO AB INITIO DA FOTOLUMINESCÊNCIA EM FILMES FINOS AMORFOS DE TITANATOS DE ESTRÔNCIO E DE BÁRIO	Emmanuelle Orhan, Carlos Davidson Pinheiro, Maria Fernanda do Carmo Gurgel, Marcos Anicete dos Santos, Fenelon Martinho Lima Pontes, Jose Arana Varela, Paulo Sergio Pizani, Elson Longo,
247 - 1	THEORETICAL AND EXPERIMENTAL LUMINESCENCE QUANTUM YIELDS OF COORDINATION COMPOUNDS OF TRIVALENT EUROPIUM	Alfredo Mayall Simas, Oscar L. Malta, Gilberto F. de Sá, Larry C. Thompson, Severino A. Júnior, Wagner M. Faustino,
246 - 1	RM1. A NEW SEMIEMPIRICAL MOLECULAR ORBITAL METHOD: PARAMETERS FOR C, H, N, O, P AND S	Gerd Bruno Rocha, Alfredo Mayall Simas,
245 - 1	SPARKLE MODEL FOR THE CALCULATION OF LANTHANIDE COMPLEXES – VERSION IV	Ricardo Oliveira Freire, Gerd Bruno Rocha, Alfredo Mayall Simas, Gilberto Fernandes de Sá,
244 - 1	ANÁLISE EXPLORATÓRIA DA METODOLOGIA DE CÁLCULO DA SUPERFÍCIE DE POTENCIAL ELETROSTÁTICO DE PIRIMIDINAS	Marcelo Zaldini Hernandes, Máira de Almeida Carvalho, João Bosco Paraíso da Silva,
243 - 1	DENSITY FUNCTIONAL STUDY OF THE BEHAVIOR COMPLEXATION OF AN ANTITUBERCULOUS COMPOUND WITH BIVALENTS CATIONS	Teodorico de Castro Ramalho, Elaine Fontes Ferreira da Cunha, Ricardo Bicca de Alencastro,
241 - 1	ESTUDO DA 1A HIPERPOLARIZABILIDADE DE DERIVADOS POLIÊNICO DA ANILINA	Ana Elizabete de Araújo Machado, Alfredo Arnóbio de Souza da Gama,
241 - 2	ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS PARA PREVISÃO DA HIPERPOLARIZABILIDADE DE DERIVADOS POLIÊNICO DOADOR-RECEPTOR	Ana Elizabete de Araújo Machado, Benício de Barros Neto, Alfredo Arnóbio de Sousa da Gama,
240 - 1	FRONTIER MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS AND ELECTROSTATIC POTENTIAL SURFACES (MEP) OF INDOLO-MALEIMIDO-CARBAZOLE DERIVATIVES BASED ON NATURAL D. GRANULATUM ALKALOIDS WITH G2 CELL CYCLE CHECKPOINT INHIBITION ACTIVITY	Flávia Pirola Rosselli, Mario Lopes Macedo, Roberto Gomes de Souza Berlinck, Albérico Borges Ferreira da Silva,
240 - 2	COMPARATIVE THEORETICAL STUDY OF TWO NITROIMIDAZOLES ASSAIED AGAISNT TRYPANOSOMA CRUZI	Flávia Pirola Rosselli, Albérico Borges Ferreira da Silva, Cristina Northfleet de Albuquerque,
239 - 1	SOLVATAÇÃO DE CAFEÍNA, TEOFILINA E TEOBROMINA EM CO2 SUPERCRÍTICO POR DINÂMICA MOLECULAR	Frank Wilson Fávero, Munir Salomão Skaf,
238 - 1	THEORETICAL INVESTIGATION OF THE ANTIMALARIAL ACTIVITY OF FEBRIFUGINE ANALOGUES THROUGH ELECTRONIC STRUCTURE INDEXES	Francisco Carlos Lavarda, Pedro Alves da Silva Autreto,
237 - 1	GENERALIZED SIMULATED ANNEALING ALGORITHM APPLIED TO ELECTRONIC STRUCTURE. THE HARTREE-FOCK-GSA METHOD	Micael Dias de Andrade, Kleber Carlos Mundim, Luiz Augusto Carvalho Malbouisson,
237 - 2	ESTUDO DE PROPRIEDADES ELÉTRICAS DE SISTEMAS MOLECULARES USANDO UM MÉTODO CI MULTI-REFERÊNCIA	Sem Autor
236 - 1	NEW IMPLEMENTATIONS IN THE AGOA PROGRAM (VERSION 2.0)	Klaus Ribeiro Cavalcante, Marcelo Zaldini Hernandes,
235 - 1	RELAÇÃO ESTRUTURA-FUNÇÃO DE FOSFOLIPASES A2. UM ESTUDO POR DINÂMICA MOLECULAR	Marcos Roberto Lourenzoni, Richard John Ward, Léo Degrève,
235 - 2	ESTUDO DA INTERAÇÃO DE PEPTÍDEOS COM INTERFACES ÁGUA-TETRA-CLORETO DE CARBONO E MICELA. VIA SIMULAÇÃO MOLECULAR E DICROÍSMO CIRCULAR	Marcos Roberto Lourenzoni, Léo Degrève, Richard John Ward,
234 - 1	ESTUDO TEÓRICO DA MUTAROTAÇÃO DA GLICOSE	Clarissa Oliveira Silva, Alexander Martins da Silva,
	ESTUDO TEÓRICO DA REAÇÃO DE NITRAÇÃO DO	Alexander Martins da Silva

234 - 2	EFFECT OF TEMPERATURE ON THE RATE OF HYDROLYSIS OF BENZENO POR NITRATOS DE ACILA CATALISADA POR ZEÓLITOS	Alexander Martins da Silva, Marco Antonio Chaer Nascimento,
231 - 1	SIMULAÇÃO DE DNA COM MODELO DE SOLVATAÇÃO DE BORN GENERALIZADO	Milton Taidi Sonoda, Munir Salomão Skaf,
229 - 1	APLICAÇÃO DO MÉTODO DE FRAÇÕES CONTINUADAS NA FOTOIONIZAÇÃO DA AMÔNIA	Edmar Moraes do Nascimento, Luiz Eugênio Machado, Evandro Marco Sidel Ribeiro, Lee Mu-Tao,
229 - 2	FOTOIONIZAÇÃO DE CH₂F₂ NA REGIÃO DO ULTRAVIOLETA DE VÁCUO	Edmar Moraes do Nascimento, Lee Mu-Tao, Luiz Marco Brescansin, Luiz Eugênio Machado,
228 - 1	TRANSPORT COEFFICIENTS IN ROOM TEMPERATURE MOLTEN SALTS	Hubert Karl Stassen, Jones de Andrade,
227 - 1	ESTADOS LMCT EM COMPOSTOS COM LANTANÍDEOS USANDO O ZINDO	Hélcio José Batista, Ricardo L. Longo,
226 - 1	GAUSSIAN BASIS SETS FOR LOW-LYING EXCITED STATES OF NEUTRAL ATOMS WITH $2 < Z < 36$	Marcelo Trade Barreto, Antônio Canal Neto, Francisco Elias Jorge,
225 - 1	QUANTUM CONTROLLED NOT GATE MADE OF COUPLED POLYACETYLENE CHAIN	Paulo Henrique Alves Guimarães, Geraldo Magela e Silva,
225 - 2	PARES DE CADEIAS ACOPLADAS DE POLIACETILENO – ESTUDO DAS FASES ESTRUTURAIS	Paulo Henrique Alves Guimarães, Geraldo Magela e Silva,
224 - 1	THE EFFECT OF HEME COMPLEXATION ON THE REDUCTIVE DECOMPOSITION OF ARTEMISININ	Alex Gutterres Taranto, José Walkimar de Mesquita Carneiro, Martha Teixeira de Araujo,
224 - 2	QSAR STUDIES OF INHIBITORS OF MACROPHAGE MIGRATION INHIBITORY (MIF)	Jocley Queiroz Araújo, Alex Gutterres Taranto, José Walkimar de Mesquita Carneiro, Janaina A. Silva,
223 - 1	COBRA: UM ALGORITMO MONTE CARLO IDEAL PARA ENOVELAR PROTEÍNAS	Roosevelt Alves da Silva, Antônio Caliri, Leo Degreve,
221 - 1	ESTUDO DAS PROPRIEDADES ÓTICAS NÃO LINEARES DE DERIVADOS PI-CONJUGADOS DE BORO-, ALUMÍNIO- E GÁLIO-CATECÓIS TRIVALENTES	Márcia Barsottelli Procópio, Amary Cesar,
220 - 1	HIGHLY ACCURATE GAUSSIAN BASIS SETS FOR WATER	Reinaldo Centoducatte, Eduardo Perini Muniz, Francisco Elias Jorge, Marcelo Trade Barreto,
219 - 1	PACKMOL: GERAÇÃO AUTOMÁTICA DE CONFIGURAÇÕES INICIAIS COMPLEXAS DE DINÂMICA MOLECULAR USANDO ESTRATÉGIAS DE EMPACOTAMENTO	Leandro Martínez, José Mario Martínez,
219 - 2	MECANISMOS DE DISSOCIAÇÃO DO HORMÔNIO TIREOIDEANO DE SEU RECEPTOR TR-(ALFA)₁ OBTIDOS COM DINÂMICA MOLECULAR COM AMOSTRAGEM AMPLIADA	Leandro Martínez, Milton T. Sonoda, Paul Webb, John D. Baxter, Munir S. Skaf, Igor Polikarpov,
218 - 1	A THEORETICAL APPROACH TO INTRAMOLECULAR ENERGY TRANSFER THROUGH CHARGE TRANSFER STATE IN LANTHANIDE COMPOUNDS	Wagner de Mendonça Faustino, Oscar Manoel Loureiro Malta, Gilberto Fernandes de Sá,
218 - 2	FIRST HYPERPOLARIZABILITY OF THE MOLECULAR EXCITED STATES: CALCULATIONS AND COMPARISON WITH EXPERIMENT	Wagner de Mendonça Faustino, D. V. Petrov,
217 - 1	THEORETICAL MODELLING OF LOW BAND-GAP ORGANIC POLYMERS	Jair Vaz Amaral, Bernardo Laks, Jordan Del Nero,
216 - 1	INVESTIGAÇÃO DO EFEITO DE SUBSTITUINTES NO ANEL AROMÁTICO PELA ANÁLISE DA MATRIZ DE DENSIDADE	Thiago Messias Cardozo, Marco Antônio Chaer Nascimento,
215 - 1	ESTUDO DE MECANISMOS DE REAÇÃO USANDO ONIOM: ATAQUE DE LDA EM THF SOBRE DIFERENTES SÍTIOS DE PRECURSOR DO ADOÇANTE MONATINA	Ataualpa Albert Carmo Braga, Nelson Henrique Morgon,
214 - 1	PATH INTEGRAL MOLECULAR DYNAMICS OF EXCESS ELECTRONS IN SUPERCRITICAL AMMONIA	Daniel Laria, Javier Rodriguez, Munir S. Skaf,
213 - 1	DINÂMICA MOLECULAR COM CAMINHO INDUZIDO DA DISSOCIAÇÃO DO HORMÔNIO TIREOIDEANO DE SEU RECEPTOR NUCLEAR: DETALHES MOLECULARES	Leandro Martinez, Munir S. Skaf, Igor Polikarpov,
213 - 2	MAPEAMENTO ESTRUTURAL E PROPRIEDADES DINAMICAS DE CATIONS TROCAVEIS EM ZEOLITA NAX DESIDRATADA	Lucimara Ramos Martins, Munir S. Skaf,
212 - 1	ELASTIC SCATTERING OF LOW-ENERGY ELECTRONS BY CF₃Cl, CF₂Cl₂, AND CCl₂F₂	Márcio Henrique Franco Bettega, Luz Guimarães Ferreira, Alexandra Pardo Policastro Natalense, Marco Aurélio

	ELECTRONS BY CI, SCF, CI, ZCZ, AND CI, CUS	Pinheiro Lima, Hiroshi Tanaka, Masashi Kitajima, Takahiro Tanaka, Hyuck Cho,
211 - 1	ESTRUTURA, MODOS VIBRACIONAIS E INTERAÇÕES INTERMOLECULARES NO ÁCIDO 2-PROPILO FOSFÔNICO EM ÁGUA	Robson Pacheco Pereira, Ana Maria Rocco, Maria Isabel Felisberti, Carlos Eduardo Bielschowsky,
211 - 2	ESPECTRO VIBRACIONAL DO OLIGO(ÓXIDO DE ETILENO): DESCRIÇÃO TEÓRICO-EXPERIMENTAL	Robson Pacheco Pereira, Ana Maria Rocco, Carlos Eduardo Bielschowsky,
210 - 1	AB INITIO 13C AND 1H CHEMICAL SHIFTS USING LOCALLY DENSE BASIS SETS	Sidney Ramos de Santana, Ricardo Luiz Longo,
209 - 1	CÁLCULO DAS FUNÇÕES DE GREEN E TRANSFERÊNCIA DE ELÉTRONS NOS SISTEMAS PIRAZINA--HX E XH--PIRAZINA--HX X=F, CL, NC, CN E CCH	Mario Ramos da Silva Júnior, João Bosco Paraíso da Silva, Mozart Neves Ramos, Alfredo Arnóbio de Souza da Gama,
207 - 1	A INTERAÇÃO DE MODELOS DE ANEL C DE FLAVONÓIDES E CUMARINAS COM A ÁGUA	Josiana Garcia de Araújo, Renato Luis Tâme Parreira, Sérgio Emanuel Galembek,
206 - 1	A NEW QUANTUM DEFINITION FOR THE CLASSICAL CONCEPT OF MOLECULAR STRUCTURE	José Rachid Mohallem,
205 - 1	TOPOLOGY OF THE POSITRONIUM ATOM HPS	Tathiana Moreira Diniz Ribeiro, Fátia Rolim de Almeida, José Rachid Mohallem,
203 - 1	ISOTOPE-A NEW PROGRAM THAT INCLUDES THE FINITE NUCLEAR MASS CORRECTIONS IN ELECTRONIC CALCULATIONS	Cristina Porto Gonçalves, Flávia Rolim, José Rachid Mohallem,
202 - 1	ELECTRONIC STATES AS BASIS FOR THE INVESTIGATION OF POSITRON AND POSITRONIUM COMPLEXES: STUDY OF THE BARRIER TO LINEARITY OF HPSO	Cristina Porto Gonçalves, Flávia Rolim de Almeida, José Rachid Mohallem,
201 - 1	USING DENSITY MATRICES TO DEFINE SEGMENTED CONTRACTED RELATIVISTIC BASIS SETS	Andre Severo Pereira Gomes, Rogerio Custodio,
201 - 2	SYSTEMATIC SEQUENCES OF RELATIVISTIC BASIS SETS FOR D- AND F-BLOCK ELEMENTS	Andre Severo Pereira Gomes, Rogerio Custodio,
196 - 1	THEORETICAL MODELLING FOR THE FRENCH PARADOX: ELECTRONIC STRUCTURE OF RESVERATROL DERIVATIVES	Sheila Cristina dos Santos Costa, Jordan Del Nero,
195 - 1	CÁLCULOS HF-SCF PARA SISTEMAS QUARKS-ELÉTRON	Joacy Vicente Ferreira, Antonio Carlos Pavão,
194 - 1	ESTUDO TEÓRICO DA AFINIDADE PROTÔNICA DE IMIDAZOLIDINAS	Suely Lins Galdino, Silvânia Maria de Oliveira, João Bosco Paraíso da Silva, Maria do Carmo Alves de Lima, Ivan da Rocha Pitta, Marcelo Zaldine Hernandez,
193 - 1	RELAÇÃO ESTRUTURA-FUNÇÃO DO FATOR DE CRESCIMENTO DE FIBROBLASTOS BÁSICO (BFGF) E DE SEU MUTANTE (M6B-BFGF)	Léo Degrève, Gustavo Henrique Brancaleoni,
193 - 2	ESTUDO DE DINÂMICA MOLECULAR DO FATOR DE CRESCIMENTO DE FIBROBLASTOS BÁSICO	Gustavo Henrique Brancaleoni, Léo Degrève,
190 - 1	ESTUDO TEÓRICO DE REAÇÕES CATALISADAS POR ZEOLITAS SUBSTITUÍDAS COM GALIO	Márcio Soares Pereira, Marco Antonio Chaer Nascimento,
189 - 1	AVALIAÇÃO DE FUNÇÕES ATÔMICAS HARTREE-FOCK PRESCINDINDO DA APROXIMAÇÃO FROZEN-CORE	André Oliveira Silva, Osmar de Souza e Silva Júnior,
188 - 1	HIDRATAÇÃO DO AMINOÁCIDO SERINA	Leonardo Frasatto, Léo Degrève, Marcos Roberto Lourenzoni, Gustavo Henrique Brancaleoni,
188 - 2	DINÂMICA E SOLVATAÇÃO DO M6B-BFGF	Leonardo Frasatto, Gustavo Henrique Brancaleoni, Léo Degrève,
187 - 1	COMPARATIVE STUDY FOR ELASTIC PROCESSES IN CCO AND CNN RADICALS BY ELECTRON IMPACT	Eduardo Veitenheimer,
187 - 2	CÁLCULO DAS SEÇÕES DE CHOQUE PARA A EXCITAÇÃO ELETRÔNICA DE CAMADAS INTERNAS DA MOLÉCULA DE CO	Eduardo Veitenheimer,
186 - 2	MODELAGEM MOLECULAR DE COMPOSTOS BENZILIDENO-IMIDAZOLÍNICOS	Marcus Vinícius Pereira dos Santos, Mario Ramos Silva Júnior, Maria Tereza Correa Lima, Silvânia Maria de Oliveira, João Bosco Paraíso da Silva, Suely Lins Galdino, Maria do Carmo A. de Lima, Ivan da Rocha Pitta

186 - 1	DESEMPENHO COMPUTACIONAL DO PROGRAMA GAUSSIAN 98 EM DIVERSAS PLATAFORMAS	Marcus Vinícius Pereira dos Santos, Sidney Ramos Santana,
184 - 1	A STUDY OF 4-(E)-AMINO-3-[(E)-4-NITROPHENYLAZO]-3-PENTEN-2-ONE AND OTHER RELATED AZOENAMINONES IN CRYSTALLINE STATE	Márcia Miguel Castro Ferreira, Rudolf Kiralj, Ivo Vencato,
184 - 2	THEORETICAL STUDY ON SOME BETA-LACTAMS AS SUBSTRATES OF THE BACTERIAL MULTIDRUG RESISTANCE ACRB PUMP	Márcia Miguel Castro Ferreira, Rudolf Kiralj,
183 - 1	QSAR AND CONFORMATIONAL STUDY OF 1H-INDOLE-3-ACETIC ACIDS WITH AUXIN ACTIVITY	Márcia Miguel Castro Ferreira, Rudolf Kiralj,
183 - 2	RELATIONSHIPS BETWEEN CRYSTAL, MOLECULAR, PHYSICO-CHEMICAL AND BIOLOGICAL PROPERTIES OF ALKYLATED 1H-INDOLE-3-ACETIC ACIDS	Rudolf Kiralj, Márcia Miguel Castro Ferreira,
182 - 1	PERDA DE ENERGIA DE ÍONS ATÔMICOS CARREGADOS AO PENETRAR EM SÓLIDOS	Itamar Borges Junior, Gustavo de Medeiros Azevedo,
180 - 1	ESPECTROS DE ABSORÇÃO O1S E N1S DE 2 FÓTONS [1+1(IV+RAIOS-X)] DO NO RESOLVIDOS VIBRACIONALMENTE	Viviane Costa Felicíssimo, Freddy Fernandes Guimarães, Amary Cesar Ferreira,
179 - 1	FORMAÇÃO DE ÓXIDO MISTO DURANTE A PREPARAÇÃO DE CATALISADORES DE ZIRCÔNIA SUPORTADA EM ALUMINA: UM ESTUDO VIA DFT E EXAFS	Alexandre Braga da Rocha, Kátia Regina de Souza, Jean Guillaume Eon, Arnaldo da Costa Faro Jr, Alexandre Amaral Leitão, Rodrigo Barbosa Capaz,
179 - 2	CONFINAMENTO DE ELÉTRONS EM DOIS PONTOS QUÂNTICOS ACOPLADOS: UM MODELO PARA COMPUTAÇÃO QUÂNTICA	Alexandre Braga da Rocha, Carlos Renato Carvalho, Ginette Jalbert, Humberto Siqueira Brandi,
178 - 1	ESTUDO DO EQUILÍBRIO TAUTOMÉRICO PARA COMPOSTOS 1,3-DICARBOXÍLICOS	Valéria Cristina Fregati Rustici, Sérgio Emanuel Galembeck,
177 - 1	CÁLCULO DE SEÇÕES DE CHOQUE DE FOTOIONIZAÇÃO DO CH4 PARA ENERGIAS NA REGIÃO VUV	Antonio Sérgio dos Santos, Lee Mu-Tao, Luis Marco Brescansin, Luiz Eugênio Machado,
176 - 1	DESENVOLVIMENTO RACIONAL DE LIGANTES E COMPLEXOS DE LANTANÍDEOS PARA DISPOSITIVOS ELETROLUMINESCENTES	Ana Carolina Roma, Ricardo Luiz Longo,
175 - 1	TRANSFERÊNCIA DE ELÉTRONS EM LIGAÇÕES DE HIDROGÊNIO ENVOLVENDO PARES DE BASE AT E GC	Ana Paula Souza Santos, João Bosco Paraíso da Silva,
174 - 1	USTE DA SUPERFÍCIE DE ENERGIA POTENCIAL PARA A MOLÉCULA HCN	André Tsutomu Ota, Gilberto Carlos Sanzovo, Kleber Carlos Mundim, Joaquim J. S Neto, Ricardo Gargano,
173 - 1	THEORETICAL INVESTIGATION OF MOLECULAR STRUCTURE OF BIS(ACETILACETONATO)COPPER (II)	Katia Julia de Almeida, Amary Cesar Ferreira,
173 - 2	ACTIVATION OF METHANE: THEORETICAL STUDY ON C-H REACTIVITY BY F-BLOCK TRANSITION ELEMENTS	Katia Julia de Almeida, Amary Cesar,
170 - 1	ESTUDO TEÓRICO DA COLISÃO ELÁSTICA ENTRE ELÉTRONS E MOLÉCULAS ISOELETRÔNICAS: SICO, CSIO E SINN	Milton Massumi Fujimoto, Sérgio Eduardo Michelin, Lee Mu-Tao,
169 - 1	ESTUDO AB INITIO E TEORIA DENSIDADE FUNCIONAL DO POTENCIAL DE IONIZAÇÃO E AFINIDADES ELETRONICAS PARA MOLÉCULAS DIATÔMICAS	Jardel Pinto Barbosa, Ilfran da Silva Nava Junior, José Ciriaco Pinheiro, João Elias Vidueira Ferreira,
169 - 2	CONSTRUÇÃO DE CONJUNTOS DE FUNÇÕES DE BASE PARA O CÁLCULO DE FREQUÊNCIAS VIBRACIONAIS DE MOLÉCULAS POLIATÔMICAS FORMADAS POR ÁTOMOS DO 1º E 2º PERÍODOS	Jardel Pinto Barbosa, Ilfran da Silva Nava Junior, Oswaldo Treu Filho, Rogerio T. Kondo,
168 - 1	ESTUDO COMPARATIVO DO MODO DE INCLUSÃO DA TETRACICLINA EM CICLODEXTRINAS	Roberta Pereira Dias, Beatriz A. Ferreira, Wagner Batista de Almeida,
167 - 1	ESTUDO AB INITIO DAS FORMAS PURA E HIDRATADA DA ALFA-CYCLODEXTRINA E COMPLEXOS DE INCLUSÃO: CH3HGCL	Charles Martins Aguiar, Roberta Pereira Dias, Cleber Paulo Andrada Anconi, Eder Severino Xavier, Willian Ricardo Rocha, Helio Ferreira dos Santos, Clebio Soares Nascimento Jr., Wagner Batista De Almeida,
166 - 1	HYDROLYSIS PROCESS OF PROPYLENIC CISPLATIN ANALOGUES: AN AB INITIO STUDY	Bruno Araújo Cautiero Horta, Hélio Ferreira dos Santos, Luiz Antônio Sodré Costa, Willian Ricardo Rocha, Wagner Batista de Almeida,
165 - 1	DINÂMICA MOLECULAR DO DODECÂMERO D (CGCGAATTCGCG)2 EM SOLUÇÃO COM CAMPO DE FORÇA OPLS	Luciano Pinho Gomes, Marçal de Oliveira Neto,

163 - 1	STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF THE AMORPHOUS HFO₂	Wanderlã Luis Scopel, Antônio José Roque da Silva, Adalberto Fazzio,
162 - 1	DYNAMICAL AND KINETIC PROPERTIES CALCULATIONS OF THE NA+HF REACTION USING TWO POTENTIAL ENERGY SURFACES	Alessandra Ferreira Albernaz Vilela, Ricardo Gargano, Kleber Carlos Mundim, Patrícia Regina Pereira Barreto,
162 - 2	DYNAMICAL AND KINETIC PROPERTIES CALCULATIONS OF THE NA + LIH->NALI + H REACTION	Alessandra Ferreira Albernaz Vilela, Ricardo Gargano, Patrícia Regina Pereira Barreto,
161 - 1	UM ESTUDO AB INITIO DA CORREÇÃO TÉRMICA PARA O DÍMERO DA ÁGUA	Wagner Batista De Almeida,
160 - 1	THEORETICAL STUDIES OF PVP-I2 CHARGE-TRANSFER COMPLEXES	Kleber de Arruda Almeida, Écio José França, Alvaro Antonio Alencar de Queiroz, Hector Alexandre Chaves Gil,
160 - 2	POLYANILINE CHROMIUM CHARGE TRANSFER COMPLEXES	Demétrio Artur Werner Soares, Marisa Grassi, Paulo Henrique Oliveira de Souza, Alvaro Antonio Alencar de Queiroz,
157 - 1	ESTRUTURA ELETRÔNICA DOS ESTADOS IÔNICOS DA ACROLEÍNA	Eveline Braga Fraga, Maria Cristina Rodrigues da Silva,
156 - 1	EFEITOS DE DEFORMAÇÕES ESTRUTURAIS EM NANOTUBOS DE CARBONO	Jussane Rossato, Ronaldo Mota, Rogério J. Baierle, Adalberto Fazzio,
154 - 1	ESTUDO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA E REATIVIDADE DOS SÍTIOS FE(II)/FE(III) E ZN(II)/FE(III) EM MODELOS BIOMIMÉTICOS AS PAPS	Sérgio de Paula Machado, Lilian Weitzel Paes, Roberto de Barros Faria, Juan Omar Machuca-Herrera, Ademir Neves,
153 - 1	PROPOSTA DE OBTENÇÃO DO CAMPO DE FORÇA DA ÁGUA LÍQUIDA VIA CÁLCULOS DE ESTRUTURA ELETRÔNICA	Marco Aurélio Alves Barbosa, Ricardo Gargano,
152 - 1	ESTUDO AB INITIO DO COMPORTAMENTO ESTRUTURAL E ELETRÔNICO DA DIMETILAMINO – BENZONITRILA E AMINO – BENZONITRILA	Rogério Custodio, Christian da Silva Rodrigues, Lauro C. Dias Jr.,
151 - 1	USING AN INTERVAL BRANCH AND BOUND ALGORITHM IN THE HARTREE-FOCK METHOD	Carlile Campos Lavor, Marco Antonio Chaer Nascimento,
150 - 1	ESTUDO COMPUTACIONAL DA INTERAÇÃO ENTRE TYR188 DA TRANSCRIPTASE REVERSA DO HIV-1 E NEVIRAPINA	Mariângela Dametto, Sérgio Emanuel Galembeck,
149 - 1	CÁLCULOS QUÍMICO-QUÂNTICOS DE HIDRETOS METÁLICOS PARA ARMAZENAMENTO DE HIDROGÊNIO	Francisco das Chagas Alves Lima, Milan Trsic, Ricardo Aroca,
148 - 1	PLACZEK: PROGRAMA DESENVOLVIDO PARA O CÁLCULO DE PROPRIEDADES RAMAN EM NÍVEIS ARBITRÁRIOS DE TEORIA	Luciano Nassif Vidal, Pedro Antonio Muniz Vazquez,
148 - 2	CORRELAÇÃO ELETRÔNICA ESTÁTICA E DINÂMICA E CONVERGÊNCIA DE FUNÇÕES DE BASE EM PERFS DE EXCITAÇÃO RAMAN	Sem Autor
147 - 1	THE INFRARED VIBRATIONAL INTENSITIES AND POLAR TENSORS OF HFCO AND DFEO	Harley Paiva Martins Filho, Roberto Luiz Andrade Haiduke, Roy Edward Bruns,
147 - 2	VIBRATIONAL INFRARED INTENSITIES AND POLAR TENSORS OF 1,2-DIFLUOROETHYLENES	Harley Paiva Martins Filho,
146 - 1	FUNÇÕES DE ONDA GVB ALÉM DA APROXIMAÇÃO DE EMPARELHAMENTO PERFEITO: IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL E APLICAÇÕES	André Gustavo Horta Barbosa, Marco Antônio Chaer Nascimento,
146 - 2	ESTUDOS TEÓRICOS SOBRE ESTRUTURA E REATIVIDADE DE CARBÂNIONS	Sem Autor
145 - 1	MECANISMO DE REAÇÃO PARA A FLUORAÇÃO DO METANOL UTILIZANDO DIETILAMINO ENXOFRE TRIFLUORETO (DAST)	Leonardo Baptista, Glauco Favila Bauerfeldt, Edilson Clemente da Silva, Graciela Arbilla,
144 - 1	ESTUDO AB INITIO CORRELACIONADO DA SUPERFÍCIE DE ENERGIA POTENCIAL DO COMPLEXO HOBR.H₂O	Cristina Maria Pereira dos Santos, Roberto de Barros Faria, Sérgio de Paula Machado, Wagner Batista de Almeida,
143 - 1	UMA NOVA ESCALA DE ANFIPATIA EM MEIO AQUOSO: UM ESTUDO POR SIMULAÇÃO MOLECULAR	Fernanda Marur Mazzé, Léo Degreve,
143 - 2	ANFIPATIA EM MEIO APOLAR	Fernanda Marur Mazzé, Léo Degreve,
142 - 1	DINÂMICA E SOLVATAÇÃO DE ENCEFALINAS EM SOLUÇÃO AQUOSA	Davi Serradella Vieira, Léo Degreve,
142 - 2	INFLUÊNCIA DO SOLVENTE NA ESTRUTURA SECUNDÁRIA DA GRAMICIDINA A, UM ESTUDO VIA	Davi Serradella Vieira, Léo Degreve,

	SIMULAÇÃO POR DINAMICA MOLECULAR	Degrève,
141 - 1	CALCULO TEORICO DA ROTAÇÃO OTICA DE MONOSSACARIDEOS	Flavio Bittencourt da Cruz, Benedetta Mennucci, Clarissa Oliveira da Silva,
140 - 1	SYNTHETIC MOLECULAR MOTOR OF NANOTUBE: IS THAT POSSIBLE?	Antônio Maia de Jesus Chaves Neto, Jordan Del Nero,
139 - 1	CARACTERIZAÇÃO DA ESTRUTURA DA GOMESINA EM MEIO AQUOSO POR SIMULAÇÃO MOLECULAR	Carlos Alessandro Fuzo, Léo Degrève,
139 - 2	TESTE DE UMA NOVA ESCALA DE ANFIPATIA FORMULADA POR SIMULAÇÃO MOLECULAR	Carlos Alessandro Fuzo, Fernanda Marur Mazzê, Léo Degrève,
138 - 1	THE DENSITY FUNCTIONAL METHOD FROM FIRST PRINCIPLES	Olavo Leopoldino da Silva Filho, Antônio Carlos Pedrosa,
137 - 1	INTERAÇÃO DE UM ANTIBIÓTICO COM MODELO DE MEMBRANAS: UM ESTUDO POR DINÂMICA MOLECULAR	Adriana Mieco Namba, Léo Degrève, Marcos R. Lourenzoni,
137 - 2	LIGAÇÕES DE HIDROGÊNIO NO MONÔMERO E NO DÍMERO DA DEFENSINA HUMANA HNP-3	Gustavo H. Brancaloni, Adriana Mieco Namba, Léo Degrève,
135 - 1	ELASTIC SCATTERING OF LOW-ENERGY BY ISOMERS OF C4H6, C4H8 AND C4H10	Adriana do Rocio Lopes, Marco Aurélio P. Lima, Luiz G. Ferreira, Márcio H. F. Bettega,
134 - 1	FITTING POTENTIAL ENERGY SURFACE FOR THE H3+ ION THROUGH GENERALIZED SIMULATED ANNEALING	Curt Max Panisset, Kleber Carlos Mundim, Ricardo Gargano, Joaquim José Soares Neto,
133 - 1	RELAÇÃO ENTRE ESTRUTURA E ATIVIDADE DE 8.O.4'- NEOLIGNANAS COM ATIVIDADE ANTIFÚNGICA	Cláudio Nahum Alves, Anderson Antonio Costa Pinheiro, Lourivaldo da Silva Santos, Rosivaldo dos Santos Borges,
132 - 1	ESTUDO TEÓRICO DO MECANISMO MOLECULAR DE REAÇÕES DE DIELS-ALDER ENTRE O CICLOPENTADIENO E O CROTONALDEIDO	Agnaldo da Silva Carneiro, Cláudio Nahum Alves,
131 - 1	UM MODELO PERIÓDICO PARA DOPAGEM DO TiO2 COM ÁTOMOS DE Nb E Cr	Luis Antonio da S. Vasconcellos, Julio Ricardo Sambrano, João Batista Lopes Martins, Armand Beltran, Gustavo. F. Nóbrega,
130 - 1	ESTUDO TEÓRICO DA REAÇÃO DE ABSTRAÇÃO DE HIDROGÊNIO CH4 + F -> CH3 + HF	Orlando Roberto Neto, Francisco Bolivar Correto Machado,
128 - 1	PONTES DE HIDROGÊNIO C-H...O EM MODELOS PARA SISTEMAS BIOLÓGICOS	Myriam Malvina Segre de Giambiagi, Pérycles Tupy Vieira Júnior, Marçal de Oliveira Neto,
127 - 1	CORRELATION FUNCTION QUANTUM MONTE CARLO STUDY OF THE VIBRATIONAL STRUCTURE OF HN+ CLUSTERS, N=2-5	Washington Barbosa Silva, Paulo Hora Acioli,
126 - 1	USING SEMIEMPIRICAL AND AB INITIO METHODS TO STUDY THE DOPED POLYACETILENE CHAIN	Alessandra Ferreira Albernaz Vilela, Ricardo Gargano, Geraldo Magela e Silva,
126 - 2	DYNAMICAL INTERACTION BETWEEN POLARONS AND TORSIONAL VIBRATIONS IN CONJUGATED POLYMERS	Geraldo Magela e Silva, Alexandre Naves de Brito,
125 - 1	ANÁLISE, ATRAVÉS DA FUNÇÃO PESO, DO EFEITO RELATIVÍSTICO EM CONJUNTOS DE FUNÇÕES DE BASE	Nelson Henrique Morgon, José Carlos B. de Lima, André L. F. P. Ramos,
125 - 2	ESTUDO TEÓRICO DAS REAÇÕES DE RIVEROS EM SISTEMAS: X- + HCO2CH3 --> [X...HOCH3]- + CO, ONDE X = F, Cl, Br E I	Nelson Henrique Morgon,
124 - 1	ESTRUTURA DE UM PEPTÍDEO HÍBRIDO CECROPINA/ MAGAININA EM MEIO AQUOSO POR SIMULAÇÃO MOLECULAR	Léo Degrève, Marcos Roberto Lourenzoni, Glaucia Maria da Silva,
124 - 2	INFLUÊNCIA DE MUTAÇÕES EM UM PEPTÍDEO HÍBRIDO CECROPINA/MAGAININA EM MEIO AQUOSO	Léo Degrève, Marcos Roberto Lourenzoni, Glaucia Maria da Silva,
123 - 1	FORMAÇÃO DE ESTADO S2(TICT) A PARTIR DA EXCITAÇÃO ELETRÔNICA DO COMPOSTO 3-BENZOXAZOL-2-IL-7-(N,N-DIETILAMINO)-CROMEN-2-ONA	Antonio Eduardo da Hora Machado, Rodrigo De Paula, Juliana Ribeiro,
123 - 2	CARACTERIZAÇÃO FOTOFÍSICA, CRISTALOGRAFICA E QUANTUM-MECÂNICA DE DOIS ANÁLOGOS DE PSORALENOS	Antonio Eduardo da Hora Machado, Silvana Guilardi, Jackson L.C. Resende, Karynne C. Souza, Grazielle B. de Oliveira, Ana Maria Ferreira de Oliveira-Campos,
122 - 1	ESTUDO AB INITIO E DFT DE AFINIDADES ELETRÔNICAS DE MOLÉCULAS DIATÔMICAS	João Elias Vídeira Ferreira, José Ciriaco Pinheiro, Jardel Pinto Barbosa, Ilfran Silva Nava Júnior, Oswaldo Trau Filho,

		Junior, Oswaldo Treda F. Lino, Rogério Toshiaki Kondo,
121 - 1	ESTUDO DA ESTRUTURA DE ÁGUA INTERCALADA EM ARGILAS SINTÉTICAS UTILIZANDO "GENERALIZED SIMULATED ANNEALING-GSA"	Jon Otto Fossum,
120 - 1	DETERMINAÇÃO DO ESTADO FUNDAMENTAL DA MOLÉCULA DE HIDROGÊNIO ATRAVÉS DA EQUAÇÃO DE HAMILTON-JACOBI E INTEGRAIS DE AÇÃO	Antonio Luciano de Almeida Fonseca, Daniel Lima Nascimento,
120 - 2	DETERMINAÇÃO DO ESTADO FUNDAMENTAL DO ÁTOMO DE HÉLIO ATRAVÉS DA EQUAÇÃO DE HAMILTON-JACOBI	Antonio Luciano de Almeida Fonseca, Daniel Lima Nascimento,
119 - 1	STRUCTURE OF THE 5A,6- ANHYDROTETRACYCLINE-PLATINUM(II) DICHLORIDE COMPLEX: A THEORETICAL STUDY	Hélio Ferreira dos Santos, Wagner Batista de Almeida,
118 - 1	SÍTIOS ÁCIDOS EM NB2O5, AL2O3 E SIO2	Tiago Andre da Silveira Fialho, João Batista Lopes Martins, Valdeilson S. Braga, Silvia Cláudia Loureiro Dias, José Alves Dias, Júlio Ricardo Sambrano,
117 - 1	ESTUDO DOS SUBSTITUINTES EM NEOLIGNANAS BENZODIOXÂNICAS	Fernando Cesário Rangel, Raquel Ferreira dos Santos, Pedro Henrique Ferri, Elaine Rose Maia,
117 - 2	ESTUDO TEÓRICO DA REGIOSELETIVIDADE DE REAÇÃO DE ACOPLAMENTO OXIDATIVO PARA A FORMAÇÃO DE EUSIDERINAS	Fernando Cesário Rangel, Raquel Ferreira dos Santos, Pedro Henrique Ferri, Elaine Rose Maia,
116 - 1	FORMAÇÃO DE ETANO EM SUPERFÍCIE DE CU/ZNO	João Batista Lopes Martins, Carlton A. Taft, Elson Longo,
116 - 2	ESTUDO AB INITIO E SEMI-EMPÍRICO DA FORMAÇÃO DE METANOL EM SUPERFÍCIE DE ZNO E CU/ZNO	Carlton A. Taft, Elson Longo, João Batista Lopes Martins,
115 - 1	O EFEITO DA PRIMEIRA CAMADA DE HIDRATAÇÃO EM INTERAÇÕES CÓDONS ANTI-CÓDONS	Pérycles Tupy Vieira Júnior, Marçal de Oliveira Neto,
114 - 1	ANÁLISE DA FOTOFRAGMENTAÇÃO DO TIOFENO (C4H4S) NAS BORDAS DO S 2P E C1S	Maria Suely Pedrosa Mundim, Nilo Makiuchi, Alexandra Mocellin, Arnaldo Naves de Brito, Nestor Correia,
113 - 1	ESTABILIDADE DE CRIPTATOS 222 ALCALINOS EM SOLUÇÃO VIA SIMULAÇÃO DE MONTE CARLO	Elisa Soares Leite, Ricardo Luiz Longo, Luiz Carlos Gomide Freitas,
111 - 1	ESTUDO TEÓRICO DA ENANTIOSELETIVIDADE DA ADIÇÃO DE ORGANOZINCO A ALDEÍDOS	Ricardo Luiz Longo, Ricardo de Carvalho Ferreira, Frederico José de Santana Pontes,
110 - 1	POTENCIAL DE TORÇÃO ANOMÉRICO	Alex Rodrigues de Andrade, Clarissa Oliveira da Silva,
108 - 1	THEORETICAL STUDY ON THE HYDRATION OF THE ANTICODON LOOP OF T-RNAPHE AND T-RNAIMET BEFORE AND AFTER CODON-ANTICODON INTERACTIONS	Amarílis de Vicente Finageiv Neder, Marçal de Oliveira Neto,
105 - 1	ESTABILIDADE RELATIVA DE RADICAIS DERIVADOS DA ARTEMISININA	Caroline Arantes da Silva, Alex Gutterres Taranto, José Walkimar de Mesquita Carneiro, Martha Teixeira de Araujo,
103 - 1	ESTUDO TEÓRICO DOS ESTADOS ELETRÔNICOS X2SIGMA(+) E A2PI DAS MOLÉCULAS BEF, MGF E CAF	Ciro Simas Vivacqua, Marina Pelegriani, Orlando Roberto-Neto, Francisco Bolivar Correto Machado,
102 - 1	ESTUDO DA GEOMETRIA E DAS FREQUÊNCIAS VIBRACIONAIS HARMÔNICAS DO RADICAL METIL	Francisco Bolivar Correto Machado, Orlando Roberto-Neto,
101 - 1	CURVA DE ENERGIA POTENCIAL DE DIMERIZAÇÃO DO O2	Jose Carlos de Freitas Paula, Antonio Carlos Pavão,
101 - 2	INFLUÊNCIA DO O4 NA FORMAÇÃO DE OZÔNIO ESTRATOSFÉRICO	Antonio Carlos Pavão, Carlton A. Taft, Jose Carlos de Freitas Paula,
100 - 1	A CONCLUSIVE SCRF AND PCM STUDY OF THE HYDROLYSIS PROCESS OF AN IMPORTANT CISPLATIN ANALOGUE	Luiz Antônio Sodrê Costa, Willian Ricardo Rocha, Wagner Batista de Almeida, Hélio Ferreira Dos Santos,
99 - 1	PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE CUBANOS DOPADOS	Paulo Monteiro Vieira Braga Barone, Suely Aparecida Faria Mazzini,
97 - 1	THE PROTECTIVE ROLE OF TREHALOSE ON MEMBRANES EXPOSED TO HIGH TEMPERATURE	Cristina S. Pereira, Roberto D. Lins, Luiz Carlos Gomide Freitas, Philippe H. Hunenberger,
96 - 1	CONVERGÊNCIA DA ENERGIA DE CORRELAÇÃO EM CÁLCULOS COM BASES CC-PVXZ	Eduardo Fischli Laschuk,
	POTENCIAIS DE INTERAÇÃO AB INITIO DE	

96 - 2	POTENCIAIS DE INTERAÇÃO AB INITIO DE DÍMEROS DE GASES NOBRES E APLICAÇÕES	Sem Autor
95 - 1	DESENVOLVIMENTO DA SUPERFÍCIE DE ENERGIA POTENCIAL PARA O DÍMERO DE HIDROGÊNIO (H₂)₂	Angelo Marconi Maniero, Luís Silva da Costa,
94 - 1	DETERMINATION OF ATOMIC ANISOTROPIES FROM GAS-PHASE INFRARED INTENSITIES	Roberto L. A. Haiduke, Anselmo Elcana de Oliveira, Roy Edward Bruns,
93 - 1	SIMULAÇÕES DE DINÂMICA MOLECULAR NA INTERFACE H₂O/ZRO₂	Lucimara Ramos Martins, Branka M. Ladanyi, Munir Salomão Skaf,
93 - 2	DINAMICA DE SOLVATAÇÃO DA CUMARINA C480 EM ZEOLITA NAX DESIDRATADA	Lucimara Ramos Martins, Munir S. Skaf,
92 - 1	SELEÇÃO DE PARÂMETROS TEÓRICOS NO ESTUDO DA RELAÇÃO ESTRUTURA-ATIVIDADE DE FLAVONÓIDES	Karen Cacilda Weber, Albérico Borges Ferreira da Silva, Káthia Maria Honório, Saulo L. da Silva,
92 - 2	INFLUENCE OF MOLECULAR PROPERTIES OF FLAVONOID COMPOUNDS IN THE INHIBITION OF THE XANTHINE OXIDASE	Karen Cacilda Weber, Saulo L. da Silva, Káthia Maria Honório, Adriano da Silva, Sérgio Marangoni, Marcos H. Toyama, Albérico B. F. da Silva,
91 - 1	ESTUDO TEÓRICO DA SOLVATAÇÃO HIDROFÍLICA DO ÂNION CARBOXILATO	Tatiane Faustino Moraes, Kaline Coutinho, Sylvio Canuto,
89 - 1	ESTUDO TEÓRICO DE MOLÉCULAS ESTRUTURALMENTE ANÁLOGAS AO RETINAL	Ranylson Marcello Leal Savedra, Milan Trsic, Melissa Fabiola Siqueira Pinto,
89 - 2	DISCUSSÃO DE UM POSSÍVEL MECANISMO DE GERAÇÃO DA INFORMAÇÃO VISUAL COM O ESTUDO DA RODOPSINA	Melissa Fabiola Siqueira Pinto, Milan Trsic,
88 - 1	THEORETICAL STUDY OF TRANSITION METALS COORDINATION COMPOUNDS WITH CROCONATE	Dalva Ester Costa Ferreira, Geórgia Maria Amaral Junqueira, Willian Ricardo Rocha, Hélio Ferreira dos Santos, Wagner Batista de Almeida,
86 - 1	ESTUDO CONFORMACIONAL DO ETILENO GLICOL POR CÁLCULOS QUÂNTICOS E DINÂMICA MOLECULAR	Osmair Vital de Oliveira, Luiz Carlos Gomide de Freitas,
85 - 1	ENERGY SPECTRUM OF A PARTICLE WITHIN A CONFINED DOUBLE WELL OSCILLATOR: FROM JAHN-TELLER EFFECT TO CHAOS	José Luis Marín Flores, Germán Campoy Güereña, Raúl Riera Aroche,
84 - 1	THEORETICAL ANALYSIS OF THE INCLUSION COMPOUNDS INVOLVING TETRACYCLINES AND CYCLODEXTRINS	Clebio Soares Nascimento Junior, Helio Ferreira Dos Santos, Marta Aparecida Ferreira de Oliveira Britto,
83 - 1	PARAMETRIZATION OF INTERMOLECULAR POTENTIALS FOR PLATINUM (II) COMPOUNDS	Juliana Fedoce Lopes, Willian Ricardo Rocha, Hélio Ferreira dos Santos,
82 - 1	THEORETICAL ANALYSIS OF THE OXOCARBONS: STRUCTURAL AND SPECTROSCOPIC PROPERTIES OF RHODIZONATE ION	Geórgia Maria Amaral Junqueira, Willian Ricardo Rocha, Wagner Batista de Almeida, Hélio Ferreira dos Santos,
81 - 1	PARAMETRIZATION OF THE PCM FOR CALCULATING SOLVATION FREE ENERGY IN OCTANOL	Gilson Rodrigues Ferreira, Helio Ferreira Dos Santos,
80 - 1	SIMULAÇÃO DE ESPECTROS DE IV DA GIBBSITA E DA CAULINITA VIA MÉTODOS DE MECÂNICA QUÂNTICA	Alexandre Camilo Junior, Marciano Alves Carneiro, André Mauricio Brinatti, Yvonne Primerano Mascarenhas,
80 - 2	ESTRUTURA ELETRÔNICA DE OLIGÔMEROS DE POLIACETILENO SUBSTITUIDOS POR ÁTOMOS DE BORO	Alexandre Camilo Junior,
79 - 1	MAPAS CONFORMACIONAIS AB INITIO DE DISSACARÍDEOS	Andre Oliveira Menezes, Clarissa Oliveira da Silva,
77 - 1	THEORETICAL INVESTIGATION OF THE ABSORPTION SPECTRUM OF DMACA IN WATER	Herbert de Castro Georg, Kaline Rabelo Coutinho,
74 - 1	ESTUDO TEÓRICO DE ALGUNS INTERMEDIÁRIOS RADICAIS E NEUTROS DA ARTEMISININA	Mírian da Silva Costa, Márcia Miguel Castro Ferreira,
73 - 1	ESTUDO DA MESO-TETRAKIS 2,6-DIFLUOROFENILPORFIRINA DE ZINCO (II)	Geraldo Roberto Friedermann, Flávio Luiz Benedito, Shirley Nakagaki, Eduardo Lemos de Sá,
72 - 1	AVALIAÇÃO DOS EFEITOS ELETRÔNICOS, ESTÉRICOS E HIDROFÓBICOS NA PSICOATIVIDADE DE CANNABINÓIDES	Káthia Maria Honório, Albérico Borges Ferreira da Silva,
72 - 2	ESTUDO TEÓRICO DAS PROPRIEDADES MOLECULARES DO AJOENE	Agnaldo Arroio, Káthia Maria Honório, Paula Homem de Mello, Karen Cacilda Weber, Albérico Borges Ferreira da Silva,
	PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E DINÂMICAS DE	

71 - 1	PROPRIEDADES ESTRUCTURAIS E DINAMICAS DE MISTURAS CONTENDO METANOL E DIMETILSULFÓXIDO	Sérgio Modesto Vechi, Munir Salomão Skaf,
71 - 2	NONLINEAR OPTICAL SPECTROSCOPY OF AQUEOUS DMSO: MOLECULAR DYNAMICS OF THE KERR EFFECT	Sérgio Modesto Vechi, Munir Salomão Skaf,
70 - 1	SYNTHESIS, EXTRACTION, AND THEORETICAL MODELLING OF XANTHONE DERIVATIVES	Rodrigo Morais Canaveira, Renato Rosseto, Lucimar Pinheiro, Diógenes Cortez, Jordan Del Nero,
69 - 1	ESTUDO TEÓRICO DA ATIVIDADE ANALGÉSICA DE COMPOSTOS CANABINÓIDES	Aginaldo Arroio, Albérico Borges Ferreira da Silva,
69 - 2	ESTUDO SEMI-EMPÍRICO DAS PROPRIEDADES MOLECULARES DO BENZOATO DE BENZILA E DA CUMARINA	Aginaldo Arroio, Káthia Maria Honório, Albérico Borges Ferreira da Silva,
68 - 1	ESTUDO TEÓRICO DA SOLVATAÇÃO DE ANTIBIÓTICOS B-LACTÂMICOS	Silvana Mattedi e Silva, Emmanuela Ferreira de Lima, Luiz Carlos Gomide Freitas,
68 - 2	ESTUDOS CONFORMACIONAIS DE POLIOXETILENO EM SOLUÇÃO AQUOSA	Luciano Tavares da Costa, Silvana Mattedi e Silva, Luiz Carlos Gomide de Freitas,
67 - 1	THE EFFECT OF THE SODIUM ION PARAMETERS IN THE STRUCTURE OF ANIONIC MICELLES IN AQUEOUS SOLUTION	André Farias de Moura, Luiz Carlos Gomide Freitas,
66 - 1	QCODES - TOPOLOGICAL ATOMIC AND MOLECULAR DESCRIPTORS	Edgardo Garcia,
65 - 1	MOLECULAR DYNAMICS STUDY ON THE GLASS TRANSITION IN CA0.4K0.6(NO3)1.4	Mauro Carlos Costa Ribeiro,
65 - 2	DEFASAMENTO VIBRACIONAL DO ÂNION ESQUARATO EM MEIO AQUOSO POR DINÂMICA MOLECULAR	Lucimara R. Martins, Mauro Carlos Costa Ribeiro, Munir S. Skaf,
64 - 1	THEORETICAL STUDY OF THE REACTIONS BF₃ + BN	Ricardo Gargano, Patrícia Regina Pereira Barreto, Alessandra Ferreira Albernaz Vilela,
63 - 1	DINÂMICA HAMILTONIANA E SÓLITONS EM CRISTAIS LÍQUIDOS FERROELÉTRICOS	Francisco Alexandre de Melo Castro, Paulo Pitanga, Aurino Ribeiro Filho, Kleber Carlos Mundim,
62 - 1	ESPECTROSCOPIA AUMENTADA POR SUPERFÍCIES – UM NOVO MODELO	Eduardo Perini Muniz, Ricardo Aroca, Milan Trsic,
61 - 1	DFT STUDY OF THE ARSENIC ADSORPTION ON IRON(III) HYDROXIDES PRESENT IN MINE TAILINGS	Hélio Anderson Duarte, Augusto Faria Oliveira,
60 - 1	PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ELETRÔNICAS DE DÍMEROS DE OXO-METALOPORFIRINAS COM METAIS DA 1A E 2A SÉRIES DE TRANSIÇÃO	Kelson Mota Teixeira de Oliveira, Milan Trsic,
60 - 2	CARACTERIZAÇÃO DAS PROPRIEDADES, EM NÍVEL SEMI-EMPÍRICO, DA FE-PORFIRINA LIGADA AXIALMENTE À H₂O, CO₂ E NO	Kelson Mota Teixeira de Oliveira, Ercila Pinto Monteiro,
59 - 1	ABOUT THE BENZOTRIAZOLE TAUTOMERISM. AN AB INITIO STUDY	Francisco Bolivar Correto Machado, Koshun Iha, Leonardo Tsuyoshi Ueno, Rodrigo O. Ribeiro, Milton S. Rocha, Maria E. V. Suárez-Iha,
59 - 2	DENSITY FUNCTIONAL STUDY OF NITROGEN ADSORPTION ONTO SI(100) SURFACE	Leonardo Tsuyoshi Ueno, Fernando Rei Ornellas,
58 - 1	CÁLCULO DE ENERGIAS DE IONIZAÇÃO PARA ÁTOMOS COM CAMADAS ABERTAS VIA TEORIA DO FUNCIONAL DE DENSIDADE	Ednilsom Orestes, Tatiani Marcasso, Klaus Werner Capelle,
57 - 1	"ESTUDO ESTRUTURAL DE ARILOXICICLOFOSFAZÊNIOS ATRAVÉS DE CÁLCULOS TEÓRICOS UTILIZANDO ONIOM"	Maurício Chagas da Silva,, Nelson Henrique Morgon,
56 - 1	UM ESTUDO DFT DO MECANISMO DE OXIDAÇÃO DO PARACETAMOL	Cláudio Nahum Alves, Joel E. M. Diniz, Rosivaldo S. Borges,
55 - 1	ESTUDO MECÂNICO QUÂNTICO DO NEUROTRANSMISSOR ACETILCOLINA	Hércules S. Miglio, Tomé M. Schmidt, Elson Longo, Antônio E. H. Machado,
54 - 1	ESTUDO TEÓRICO DO ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS POR CS NAS FAIXAS DE ENERGIAS BAIXA E INTERMEDIÁRIA	Antonio Moreira de Cerqueira Sobrinho, Lee Mu-Tao,
53 - 1	CONJUGATED DENDRIMER: CHARACTERIZATION OF A NEW CLASS OF ORGANIC MATERIALS	Jordan Del Nero,
53 - 2	SEMIEMPIRICAL/CI AND AB INITIO CHARACTERIZATION OF ANTIDEPRESSANT MOLECULES	Jordan Del Nero, Luciana Brandão Carreira Del Nero,
52 - 1	ESTUDO DA ISOMERIA CIS-TRANS DO ÍON COMPLEXO DI FLUORO BIS ETILENODIAMIN (CROMO III) POR TFD	Alexandre Néelson Martiniano Carauta, José Walkimar de Mesquita Carneiro, Paulo Corrêa

	CHROMOPHORE FOR THE	de Mello,
52 - 2	HYPERCONJUGATION EFFECTS OF THE NITROGEN LONE-PAIR IN HALF-CAGE AMINES	José Walkimar de Mesquita Carneiro, Alexandre Néelson Martiniano Carauta, Peter Rudolf Seidl, José Glauco Ribeiro Tostes,
51 - 1	INSULATOR METAL TRANSITION INVESTIGATION OF SINGLE-WALLED CARBON NANOTUBE	Carlos Alberto Brito da Silva Júnior, Jordan Del Nero, Victor Dmitriev,
50 - 1	CARBON NITRIDE NANOTUBES: BRANCHING AND RING STRUCTURES	Ana Claudia Monteiro Carvalho, Maria Cristina dos Santos,
49 - 1	EFEITO DE SUBSTITUINTES NO BAND GAP DO COPOLÍMERO POLI-P-FENILENO/POLI-TIOFENO	Marcos Roberto Ribas, Regina M. Q. de Mello, Eduardo Lemos de Sa,
49 - 2	ESTUDO MECÂNICO-QUÂNTICO SEMI-EMPIRÍCO SOBRE SESQUITERPENOS ALTAMENTE OXIDADOS DO TIPO CUPARENO	Marcos Roberto Ribas, Julio Cesar Pereira dos Santos, Eduardo Lemos de Sa, Satoshi Tahara, Noemia K. Ishikawa,
47 - 1	A SURVEY OF PROSPECTIVE SENSITIZERS FOR USE IN PHOTODYNAMIC THERAPY	Cristina Aparecida Setúbal, Joaquim Delphino Da Motta Neto,
47 - 2	SEMIEMPIRICAL CALCULATIONS AND ELECTROCHEMICAL CHARACTERIZATION OF HALOGENATED TETRAKIS-PHENYLPORPHYRINS	Flávio Luis Benedito, Geraldo Roberto Friedermann, Shirley Nakagaki, Joaquim Delphino Da Motta Neto,
46 - 1	CÁLCULO DO DESDOBRAMENTO POR TUNELAMENTO NO MALONALDEÍDO UTILIZANDO O MÉTODO MCTDH	Maurício D. Coutinho Neto, Uwe Manthe,
45 - 1	REATIVIDADE EM REAÇÕES DE DIELS-ALDER ENTRE CICLO-ENONAS E CICLOPENTADIENO: UM ESTUDO TEÓRICO	Valdemar Lacerda Júnior, Kleber Thiago de Oliveira, Luiz Carlos da Silva Filho, Mauricio Gomes Constantino, Sergio Emanuel Galembeck,
44 - 1	CARACTERIZAÇÃO TEÓRICA DA MOLÉCULA DE SALVINORIN A	Ricardo Mercadante, Lucilaine de Assumpção, Luciane de Lima Pelaquim,
44 - 2	ESTUDO CONFORMACIONAL DO CÁTION 2-DCCTA	Ricardo Mercadante, Karen Cacilda Weber, Lucilaine de Assumpção, Flavia Giovana Manarin,
43 - 1	THERMOCHEMISTRY OF ATMOSPHERIC SULFUR COMPOUNDS	Stella Maris Resende, Fernando Rei Ornellas,
43 - 2	A REAÇÃO ATMOSFÉRICA ENTRE DMSO E CL	Solange Vandresen, Stella Maris Resende,
42 - 1	REACTION KINETICS OF OH- ADDITION TO CO2 IN AQUEOUS SOLUTION: A THEORETICAL STUDY USING THE CLUSTER-CONTINUUM MODEL AND A TEST OF A MULTILAYER-MULTILEVEL METHOD	Josefredo Rodriguez Pliego Júnior,
42 - 2	ESTUDO AB INITIO DA CINÉTICA DA REAÇÃO H2O + HCONH2 EM SOLUÇÃO AQUOSA: RESOLVENDO A CONTROVÉRSIA SOBRE A HIDRÓLISE NEUTRA DE AMIDAS	Gizelle Inácio Almerindo, Josefredo Rodriguez Pliego Júnior,
41 - 2	THERMOCHEMISTRY OF BNHXFY MOLECULE	Ricardo Gargano, Alessandra F. A. Vilela, Patricia Regina Pereira Barreto,
41 - 1	THERMOCHEMISTRY OF NXHYFZ MOLECULE	Ricardo Gargano, Alessandra F. A. Vilela, Patricia Regina Pereira Barreto,
40 - 1	ALTERNATIVE APPROACH TO REDUCE THE NUMBER OF ELECTRONIC INTEGRALS IN HARTREE-FOCK METHODS THROUGH GENERALIZED GAUSSIAN	Kleber Carlos Mundim,
39 - 1	NOVA ESTRUTURA PARA LIGAÇÃO DE HIDROGÊNIO ENTRE PIRAZINA E ÁGUA	Thaciana Valentina Malaspina, Sylvio Canuto,
38 - 1	ANÁLISE CONFORMACIONAL DA CROTAMINA POR MÉTODOS TEÓRICOS DE ADIÇÃO DE UNIDADES DE AMINOÁCIDOS	Antônio José do Nascimento Fernandes, Ana Maria Henrique Moniz, Maria Cristina dos Santos, Wagner Batista de Almeida, Antônio Flávio de Carvalho Alcântara,
38 - 2	ABORDAGEM TEÓRICA SOBRE O EFEITO DE GRUPOS O-SUBSTITUINTES NO MIO-INOSITOL	Ana Maria Henrique Moniz, Antônio José do Nascimento Fernandes, Maria Cristina dos Santos, Wagner Batista de Almeida, Antônio Flávio de Carvalho Alcântara,
37 - 1	HYDRATED ELECTRON: A THEORETICAL STUDY	Valdemir Ludwig, Sylvio Canuto,
37 - 2	THE UV ABSORPTION SPECTRUM OF BENZOTRIAZOLE TAUTOMERS	Antonio Carlos Borin, Luis Serrano-Andrés, Valdemir

		Ludwig, Sylvio Canuto,
36 - 1	INVESTIGATION OF INSULATOR METAL TRANSITION OF POLYDIACETYLENE	Nei Marçal, Bernardo Laks, Jordan Del Nero,
36 - 2	ESTRUTURA ELETRÔNICA E ABSORÇÃO ÓPTICA DO POLI(TRANS-1,2-DI(2-TIENIL)ETILENO)	Nei Marçal, Bernardo Laks,
35 - 1	CÁLCULO DE ENERGIAS DE IONIZAÇÃO DE CAMADAS INTERNAS (CEBES) COM ALTO NÍVEL DE PRECISÃO. EMPREGANDO TFD (TEORIA DO FUNCIONAL DE DENSIDADE)	Yuji Takahata,
34 - 1	DFT STUDY OF THE INTERACTION OF AS(III) AND CYSTEIN IN AQUEOUS SOLUTION	Sirlaine Diniz Ferreira, Antônio Luiz Oliveira de Noronha, Hélio Anderson Duarte,
34 - 2	INTERAÇÃO DO AL(III) COM ÁCIDO CÍTRICO UTILIZANDO CÁLCULOS DE FUNCIONAL DE DENSIDADE	Luciana Guimarães, Augusto Faria Oliveira, Hélio Anderson Duarte,
33 - 1	ESTUDO AB INITIO DE REAÇÕES QUÍMICAS ENVOLVENDO CFC'S: CF₂CL₂, CHF₂CL, RADICAL OH	Eder Severino Xavier, Willian Ricardo Rocha, Helio Ferreira Dos Santos, Wagner Batista De Almeida,
33 - 2	ESTRUTURA MOLECULAR DE CP-M(CO)₂, (CP =ETHA-5-C₅H₅; M=RH, IR) E DE METALOCENOS MODIFICADOS	Eder Severino Xavier, Wagner Batista De Almeida, Willian Ricardo Rocha,
31 - 1	ESTUDO TEÓRICO DA RELAÇÃO ENTRE A ESTRUTURA E ATIVIDADE DO PARACETAMOL E SEUS DERIVADOS ANÁLOGOS	Joel Estevo de Melo Diniz, Rosivaldo dos Santos Borges, Cláudio Nahum Alves,
30 - 1	ESTUDO TEÓRICO DA ESTABILIDADE DE TAUTÔMEROS DERIVADOS DA FENILISOXAZOLONA	Israel Nazareno Athayde do Amaral, Cláudio Nahum. Alves, Rosivaldo dos Santos Borges,
29 - 1	CARACTERIZAÇÃO DE MOLÉCULAS DIATÔMICAS FORMADAS POR BE, MG E CA COM ÁTOMOS DO SEGUNDO PERÍODO	Marina Pelegrini, Orlando Roberto Neto, Francisco Bolivar Correto Machado,
29 - 2	ESTUDO DA GEOMETRIA E DA FREQUÊNCIA VIBRACIONAL DA MOLÉCULA METILAMINA PELO MÉTODO COUPLED CLUSTER	Marina Pelegrini, Orlando Roberto Neto, Francisco Bolivar Correto Machado,
27 - 1	CONFORMATIONAL ANALYSIS AND VIBRATIONAL STUDY OF DI-N-PROPYL AND DI-I-PROPYLPHOSPHONATES BY MM/QM METHOD	Alexandre Nelson Martiniano Carauta, Claudio Alberto Téllez Soto, José Walkimar de Mesquita Carneiro,
27 - 2	ANÁLISE CONFORMACIONAL E ESTUDO DA DIMERIZAÇÃO DE ESTRUTURAS MÉDIAS DE ASFALTENOS	Alexandre Nelson Martiniano Carauta, Peter Rudolf Seidl, Júlio César Corrêia Guedes, Daniel Moura Silva,
26 - 1	ESTUDO DFT DE [FE₂CL₂(MI-CL)₂(HOPR)₄] – UM NOVO MATERIAL DE PARTIDA PARA A SÍNTESE DE COMPLEXOS DE FERRO(II)	Pedro Henrique Curi de Camargo, Rúbia Camila Ronqui Bottini, Giovana Gioppo Nunes, George Jeffery Leigh, Peter Brian Hitchcock, David Jordan Evans, Jaísa Fernandes Soares, Eduardo Lemos de Sá,
26 - 2	ESTUDO DFT DE [V₂(MI-OPRI)₂(OPRI)₆] – UM MATERIAL DE PARTIDA PARA A SÍNTESE DE COMPLEXOS DE FERRO/VANÁDIO	Eduardo Lemos de Sá, Vivian Dayse Ribeiro de Freitas, Giovana Gioppo Nunes, George Jeffery Leigh, Peter Brian Hitchcock, David Jordan Evans, Serge I. Gorelski, Jaísa Fernandes Soares,
25 - 1	DISSOCIAÇÃO DE AGREGADOS MOLECULARES DE LACTONITRILA COM ÁGUA	Roberto Rivelino de Melo Moreno, Sylvio Roberto Accioly Canuto,
24 - 1	RESULTADOS DA ANÁLISE DO PH VIA EQUAÇÕES DE POISSON-BOLTZMANN E DEBYE-HÜCKEL EM SISTEMAS COM SIMETRIA ESFÉRICA	Tereza Pereira de Souza, Augusto Agostinho Neto, Hernan Chaimovich, Iolanda Midea Cuccovia, Dino Zanette,
23 - 1	DETERMINAÇÃO TEÓRICA DO COEFICIENTE DE DIFUSÃO DE HIDROCARBONETOS EM ZEÓLITAS: MISTURAS DE ETILENO E ISOBUTANO EM ZSM-5	João Otávio Milam de Albuquerque Lins, Marco Antonio Chaer Nascimento,
23 - 2	UM ESTUDO TEÓRICO EM NÍVEL AB-INITIO DE HIDRETOS DE AGLOMERADOS DE PRATA E SUAS APLICAÇÕES EM CATÁLISE HETEROGÊNEA	João Otávio Milam de Albuquerque Lins, Marco Antonio Chaer Nascimento,
22 - 1	CORRELAÇÃO ESTRUTURA-ESTABILIDADE EM RADICAIS LIVRES DE FLAVONÓIDES	Alexandre da Silva Antunes, Mauro Barbosa de Amorim, Ricardo Machado Kuster, Antonio Jorge Ribeiro da Silva, Ana Carla Moreira da Silva,
21 - 1	POLARIZATION EFFECT ON THE STRUCTURE AND DYNAMICS OF MOLTEN NACLO₃	Leonardo José Amaral de Siqueira, Sérgio Minoru Urahata, Mauro Carlos Costa Ribeiro,
20 - 1	ESTUDO QUÂNTICO DE ÁTOMOS E MOLÉCULAS CONFINADOS EM CAIXAS DE ELLIPSE	Luís Silva da Costa, Frederico Vasconcelos Prudente, Angelo Marconi Moreira, José David M

	CONFINADOS EM CAIXAS DE FULLERENOS	marconi maniero, Jose David M. Vianna,
20 - 2	ESTUDO DE CLUSTERS MOLECULARES COM APLICAÇÕES PARA O (H2)3	Luís Silva da Costa, David C. Clary,
19 - 1	THE LOWEST SINGLET AND TRIPLET ELECTRONIC STATES OF NIC REVISED	Antonio Carlos Borin, Luiz Guilherme M. de Macedo,
18 - 1	PROPRIEDADES NMR DAS LIGAÇÕES DE HIDROGÊNIO NOS CLUSTERS CH3OH...OH2 E CH3HO...H2O. UM ESTUDO AB INITIO	Eudes Eterno Fileti,
17 - 1	NOVOS MODELOS PARA CÁLCULO DE ENERGIA LIVRE DE SOLVATAÇÃO EM SIMULAÇÕES DE DINÂMICA MOLECULAR	Paulo Fernando Bruno Gonçalves, Hubert Stassen,
17 - 2	UTILIZAÇÃO DE UM NOVO MODELO PARA CÁLCULO DE ENERGIA LIVRE DE SOLVATAÇÃO NO CÁLCULO DE LOG	Paulo Fernando Bruno Gonçalves, Hubert Stassen,
16 - 1	UM ESTUDO DO EFEITO DE ACOPLAMENTOS NÃO-ADIABÁTICOS SOBRE A SEÇÃO DE CHOQUE DE FOTODISSOCIAÇÃO USANDO UM MÉTODO DE PROPAGAÇÃO TEMPORAL DO PACOTE DE ONDA	Frederico Vasconcellos Prudente, Luiz Augusto Carvalho Malbouisson,
15 - 1	OBTENÇÃO DE SUPERFÍCIES DE ENERGIA POTENCIAL USANDO REDES NEURAIS ARTIFICIAIS	Vivianni M. L. dos Santos, Ricardo L. Longo,
14 - 1	VIBRATIONAL SPECTRA OF NEW BISPERYLENE DERIVATIVES	Cíntia Beatriz de Oliveira, Milan Trsic, Ricardo F. Aroca,
13 - 1	ESTRUTURAS METAL-ORGÂNICAS: DESENVOLVIMENTO E FUNCIONALIZAÇÃO	Claudia de Figueiredo Braga, Ricardo Luiz Longo,
12 - 1	UM ESTUDO DA RALAÇÃO ESTRUTURA-ATIVIDADE (SAR) DE QUINONAS COM ATIVIDADE ANTI-CHAGÁSICA	Fábio Alberto de Molfetta, Albérico Borges Ferreira da Silva,
11 - 1	EFEITO DA CONFORMAÇÃO MOLECULAR SOBRE AS CARGAS ATÔMICAS	Glaciete Sarmiento Maciel, Edgardo Garcia,
10 - 3	APLICAÇÃO DA TEORIA DE MATRIZ DENSIDADE NA ANÁLISE DE EFEITOS PROVENIENTES DE FUNÇÕES DE BASE PARA CÁLCULOS COM PSEUDOPOTENCIAL	Rogério Custodio, Ednalva D. R. da Silva Duarte,
10 - 2	MONTE CARLO QUÂNTICO E O VÍNCULO FORMAL COM A TEORIA DE MATRIZ DENSIDADE	Juliana de Lima Paschoal, José Roberto dos Santos Politi, Rogério Custodio,
9 - 1	AS INTENSIDADES DE INFRAVERMELHO E O TENSOR POLAR DO CH3NC	Roberto Luiz Andrade Haiduke, Roy Edward Bruns, Yoshiyuki Hase,
9 - 2	A IMPORTÂNCIA DE DIPOLOS ATÔMICOS E FLUXOS DE CARGA E DIPOLO ATÔMICOS NA ANÁLISE DE PROPRIEDADES MOLECULARES	Roberto Luiz Andrade Haiduke, Roy Edward Bruns,
7 - 1	DETERMINAÇÃO TEÓRICA DOS VALORES DAS CONSTANTES DE DESPROTONAÇÃO (PKA) PARA A HISTAMINA	Heitor Avelino de Abreu, Wagner Batista de Almeida, Hélio Anderson Duarte,
7 - 2	ESTRUTURA E ESTABILIDADE DO HOMODÍMERO (PCCP)2	Cleber Paulo Andrada Anconi, Heitor Avelino de Abreu, Éder Severino Xavier, Mauro Lúcio Franco, Hélio Anderson Duarte, Wagner Batista de Almeida,
6 - 1	APLICAÇÃO DE UM CAMPO DE FORÇA EMPÍRICO PARA COMPLEXOS SIDERÓFOROS ALFA-HIDROXICARBOXILATOS-FE(III)	Anna Maria Canavarro Benite, Bianca da Cunha Machado, Juan Omar Machuca-Herrera, Sergio de Paula Machado,
5 - 1	SOLUÇÃO INDIRETA DA EQUAÇÃO DE HILL-WHEELER PARA O ÁTOMO DE HIDROGÊNIO	Wagner Fernando Delfino Angelotti, Milan Trsic,
4 - 1	ESTUDO TEÓRICO DE TAUTÔMEROS DA FLORETINA	Cláudio Nahum Alves, Alexandre L. A. Bentes,
3 - 1	UM ESTUDO QUIMIOMÉTRICO DE FLAVONÓIDES COM AÇÃO ANTI-HIV-1 USANDO REGRESSÃO LINEAR MÚLTIPLA	Jerônimo Lameira Silva, Cláudio Nahum Alves,
2 - 1	A QM/MM HYBRID SIMULATION OF 7-AZA-TRYPTOPHAN	Marcos Serrou do Amaral, Amando Siuiti Ito, Michel Loos,
2 - 2	SIMULATION OF ULTRA-VIOLET ABSORPTION SPECTRA USING QM/MM HYBRID SIMULATIONS WITH EXPLICIT SOLVENT REPRESENTATION	Marcos Serrou do Amaral, Amando Siuiti Ito, Michel Loos,