

Numero do painel	Apresentador	Codigo	Titulo	Autores	
PT01	Aldo S Cardoso	1	Analysis of the coulombic explosion of the photoexcited DMS [CH ₃ -S-CH ₃] molecule using statistical methods	<u>A. S. Cardoso</u> , R. B. Bernini, Lautaro R. Varas, L. H. Coutinho, G. G. B. de Souza	
PQ01	Alessandra S Barbosa	2	Theoretical and experimental cross sections for elastic scattering of electrons by chlorobenzene	<u>Alessandra Souza Barbosa</u> , Marcio T. do N. Varella, Sergio D'A. Sanchez, Francisco Blanco, Gustavo Garcia, Joao Ameixa, Paulo Limao-Vieira, Filipe Ferreira da Silva, Marcio H. F. Bettega	
PT02	Aline M dos Santos	9	Photofragmentation Study of the Acetaldehyde (CH ₃ CHO) at the Carbon and Oxygen K Edges	Leonardo C. Ribeiro, Manuela S. Arruda, Frederico V. Prudente, Luiz A. V. Mendes, Antônio C. F. Santos, Mabele de J. Santos, Ricardo R. T. Marinho, <u>Aline Medina</u>	
PQ02	Alvaro N de Oliveira	12	Time of flight spectrometry of species generated from Matrix Isolation Sublimation	<u>A. N. Oliveira</u> , W. Wolff, D. M. Silveira, V. L. B. de Jesus, E. C. Montenegro, L. M. Sigaud, C. L. Cesar	
PT03	Amanda G da Veiga	13	Spectroscopic Study of recycled poly(vinylidene fluoride)	<u>Amanda Garcez da Veiga</u> , Marysilvia Ferreira da Costa, Maria Luiza M. Rocco	
PQ03	Amanda T Alencar	10	The Stern-Gerlach Interferometer and the Twin Atoms	<u>Amanda Alencar</u> , I. Prazeres, Ginette Jalbert, C. R. Carvalho, F. Impens, F. V. Prudente, A. Medina, N. V. de Castro Faria	
PT04	André P de Oliveira	3	Development of Octave functions for quantum chemistry methods using Gaussian type orbitals	André Pacheco de Oliveira, Ginette Jalbert, Alexandre Braga da Rocha	
PT05	Antônio F C Arapiraca	17	Vibrationally averaged dipole moments of methane and benzene deuterated isotopologues	<u>Antônio F. C. Arapiraca</u> , José Rachid Mohallem	
PT06	Antonio M. de C Sobrinho	19	Cálculos MHHFCI para a molécula BH na base double-zeta	<u>Antonio Moreira de C. Sobrinho</u> , Micael D. de Andrade e Luiz A. C. Malbouisson	

PQ04	Barbara M T C Peluzo	22	A DFT study of the structure and stability of Al-Mg nanoclusters	Barbara M. T. Peluzo, Mateus A. M. Paiva,, Breno R. L. Galvão	
PQ05	Beliato S Campos	24	Interação de íons energéticos com moléculas de CO ₂ em fase condensada e análise pela técnica FTIR	<u>Beliato Santana Campos</u> , Luiz Antonio V. Mendes, Enio Frota da Silveira	
PQ06	Bruno N C Tenório	4	Calculation of Photoionization Cross-Section Using Square Integrable (L2) Basis Sets for Atoms and Molecules	<u>Bruno Nunes Cabral Tenório</u> , Alexandre Braga da Rocha, Marco Antonio Chaer do Nascimento	
PQ07	Caio Pinheiro	28	Análise da Hidroxietilcelulose pela técnica de FT-IR	Caio H. Pinheiro, Ana Claudia A. S. da Silva. Kumiko K. Sakane	
PT07	Camilla Codeço	29	Si nanostructures induced by ion-beam impact on SiO ₂	<u>C. F. Codeço</u> , S. L. A. Mello, G. M. Penello, K. S. F. M. Araújo. A. C. F. Santos, M. M. Sant'Anna	
PQ08	Carlos E Fellows	30	Simulated annealing procedure as a tool for molecular constants retrieval: The electronic transition $A^2\Sigma^+-X^2\Pi$ of N ₂ O ⁺ radical 000-000 band case.	<u>C. E. Fellows</u> , L. L. Lessa, A. S. Martins	
PQ09	Carlos X Oliveira	32	Estudo teórico e topológico do padrão de fragmentação do aminoácido cisteína formado pela ionização dos estados de valência.	Carlos X. Oliveira, Oscar C. Araújo, Maria Suely P. Mundim, Alexandra Mocellin	
PT08	Carmen Cisneros	33	Photolysis of Formic Acid at 355nm	<u>Carmen Cisneros</u> , Teonanacatl Bautista, Denhi Martínez, Ignacio Álvarez, Alfonso Guerrero	
PQ10	Cintia A P da Costa	34	L-Valine decomposition by H ⁺ , He ⁺ and N ⁺ MeV ions	<u>Cintia A.P. da Costa</u> , and E.F. da Silveira	
PT09	Delvany G de Castro	37	Estudo teórico de colisões reativas entre dois radicais NH	<u>Delvany .G. de Castro</u> , Francisco .F. Abreu, Ballester, M. Y.	
PT10	Denise Lima Assafrão	39	Elastic positron scattering from H ₂ , N ₂ e O ₂ using ab initio potentials.	<u>Denise Assafrão</u> , Kaio Mazon, Luis Poveda e J. R. Mohallem	
PQ11	Diana Andrade	44	Radiolysis of different allotropic water ices	<u>Diana P. P. Andrade</u> , Ana L. F. de Barros , Sergio Pilling, Enio F. da Silveira	

PT11	Éder da Silva e Sá	47	Determinação espectrofotométrica de ácido salicílico em formulação farmacêutica usando curva de calibração	<u>Éder da Silva e Sá</u> , Iolanda Cruz Vieira	
PT12	Eduardo de C Ribeiro	53	Utilizando o Método HFGauss–GSA para Obtenção de uma Nova Base Atômica do tipo Double-Zeta para o Boro	<u>Eduardo de Cerqueira Ribeiro</u> , Luiz Augusto Carvalho Malbouisson e Micael Dias de Andrade	
PQ12	Eduardo P da Rocha	54	Substituent effects on the thermodynamics parameters and emission energies of 2-amino-1,4-naphthoquinone derivatives	<u>Eduardo Pereira da Rocha</u> , Teodorico Castro Ramalho	
PQ13	Felipe O Ventura	18	Espalhamento elástico entre átomos de H e entre os seus isotopólogos no regime de baixas temperaturas	<u>Felipe Oliveira Ventura</u> , Marcílio Nunes Guimarães, Frederico Vasconcellos Prudente, Antônio Francisco Cruz Arapiraca, Cristina Porto Gonçalves, José Rachid Mohallem	
PQ14	Flavio N Rodrigues	64	Bethe surface, elastic and inelastic differential cross sections for CF ₃ CHClBr obtained by electron scattering with 1 keV incident electrons	<u>Rodrigues, Flavio. N</u> ; Ferreira-Rodrigues, A. M.; Pontes, F. C.; Lucas, C. A., Souza, S. M; de Souza, Gerson. G. B.	
PT13		65	Valence shell studies for DMDS molecule by angle-resolved electron-energy-loss spectroscopy	<u>Rodrigues, Flavio. N.</u> ; Varas, L. R.; Ferreira-Rodrigues, A. M. ; Pontes, F. C.; Simões, Grazieli.; de Souza, Gerson. G. B	
PT14	Francisco de Freitas Abreu	38	Transferência de energia em colisões de N ₂ com H ₂	<u>Francisco de Freitas Abreu e Delvany de Castro Gomes</u>	
PT15	Frederico V Prudente	119	Study of two electrons in a harmonic anisotropic quantum dot using a configuration interaction approach	A. M. Maneiro , L. S. F. Olavo , C. R. de Carvalho, <u>F. V. Prudente</u> , G. Jalbert	
PT16	Gabriela Moura	21	Estudo da distribuição de CO ₂ e derivados protonados na superfície molecular aquosa em função de sua acidez	<u>Gabriela Moura</u> , A. H. A. Gomes, V. Ekholm, I. Unger, C. Saak, O. Björneholm, A. Naves de Brito	
PT17	Giseli M Moreira	71	Collisions electrons of low-energy by SiF ₄ and GeF ₄	<u>Giseli Maria Moreira</u> , and Márcio Henrique Franco Bettega	

PQ15	Gunar V S Mota	72	Theoretical Predictions of Collision-Induced Absorption spectra from first principles at 300 K by molecular H ₂ pairs	<u>Gunar V.S. Mota, Lothar Frommholdy</u>	
PT18	Heidy M Quitián-Lara	73	The stability of hydrogenated PAHs in circumstellar environments	<u>Heidy M. Quitián-Lara</u> , Thiago Monfredini, Hugo Luna, Wania Wolff 2 Heloisa M. Boechat-Roberty	
PQ16	Helder K Tanaka,	74	Estudo da Fotoestabilidade de Moléculas de Interesse Biológico	<u>Helder K. Tanaka</u> , Ricardo R. T. Marinho	
PT19	Hemerson Duarte	57	Cluster analysis emitted from condensed Argon ices irradiated by heavy ions	<u>Hemerson Duarte</u> , Enio F. da Silveira and Rafael Martinez	
PQ17	Hugo M.R de Luna	52	Seções de Choque de Ionização e Captura Eletrônica na Ionização Múltipla de H ₂ O por impacto de Li ³⁺	<u>H. Luna</u> , W. Wolff, and E.C. Montenegro, André C. Tavares, H.J. Lüdde, G. Schenk, M. Horbatsch, and T. Kirchner	
PQ18	Humberto V Duque	78	Espalhamento de Elétrons por Molécula Análoga da Desoxirribose: Tetrahydrofurano	<u>Humberto V. Duque</u> , T. P. T. Do, Maria C. A. Lopes, D. A. Konovalov, R. D. White, M. J. Brunger e D. B. Jones	
PT20		79	Espalhamento de Elétrons por Molécula Análoga da Desoxirribose: Álcool α -Tetrahydrofurfuril	<u>Humberto V. Duque</u> , Luca Chiari, D. B. Jones, Zoe Pettifer, Maria. C. A. Lopes e M. J. Brunger	
PQ19	Italo Prazeres	14	Towards the twin atoms	<u>Italo Prazeres</u> ; F. Zappa; A. Alencar; S. R. Varella Junior; L. O. Santos, C. R. Carvalho; M. M. Goulart, Ginette Jalbert, N. V. de Castro Faria and A. Medina	
PT21	Jessica B Martins	5	Ionic Desorption from Astrophysical Ice Analogs by Energetic Electrons: Implications for the Detectability of Interstellar N-Heterocycles	<u>Jessica B. Martins</u> , Fabio A. Ribeiro, Carlos E. V. de Moura, Wania Wolff, Maria Luiza Rocco, Alexandre B. Rocha	
PT22	João G S Monteiro	83	The impact of different curvilinear coordinates in the VSCF calculations of water dimer	<u>João G S Monteiro</u> , André G H Barbosa	
PQ20	João P A de Mendonça	84	Theoretical and Experimental Study of C-H Bands in Graphene Oxide Spectra	<u>João Paulo Almeida de Mendonça</u> 1, Alessandro Henrique de Lima, Georgia Maria Amaral Junqueira, Welber Gianini Quirino, Cristiano Legnani and Fernando Sato	

PQ21	Joselaine C Gonzalez	70	Using linear combination of NEXAFS spectra to characterize radiation damage in insulin	Joselaine C. Gonzalez ; Grazieli. Simões; Rafael Bernini e Gerardo. G. B. de Souza	
PT23	Josenilton N Sousa	27	Estudo Teórico-Experimental da seção de choque de fotoionização e fotoabsoção do Pirrol na região do ultravioleta de vácuo	Josenilton do Nascimento Sousa, Frederico Vasconcellos Prudente, Milton Massumi Fujimoto, Manoel G. P. Homem, Helder Kenji Tanaka, Ricardo dos Reis Teixeira, Bruno Cecilio Credidio, Luiz E. Machado	
PQ22	Julio C Ruivo	86	Estudos de Estados Aniônicos da para-Benzquinona por meio de abordagem colisional e de métodos multiconfiguracionais	Julio C. Ruivo, Fábris Kossoski e Márcio T. do N. Varella	
PT24	Laís Leal Lessa	31	Análise Espectroscópica do Nitrogênio: Segundo Sistema Positivo	Laís Leal Lessa, Carlos Eduardo Fellows	
PT25	Leonardo G. Diniz	85	Very accurate non-adiabatic calculations of the rovibrational levels of LiH isotopologues	Leonardo G. Diniz, Alexander Alijah, and José Rachid Mohallem	
PT26	Leticia da Silva Maioli	87	Espalhamento elástico de elétrons de baixa energia por moléculas de nitrobenzeno	Leticia da Silva Maioli, Márcio H. F. Bettega	
PQ23		88	Espalhamento elástico de elétrons de baixa energia por moléculas de CH ₃ CN	Leticia da Silva Maioli, Márcio H. F. Bettega	
PT27	Lucas M Cornetta	89	Free Energy Barrier for Dissociation of the Guanosine Monophosphate Anion in Water	Lucas Medeiros Cornetta, Marcio Teixeira do Nascimento Varella	
PT28	Lucas M Sigaud	49	Seções de choque para os diferentes caminhos de formação de CH ₂ ⁺ via a fragmentação de CH ₄ por impacto de elétrons	L Sigaud e E C Montenegro	
PQ24		50	Produção do dicátion de Etileno por impacto de elétrons	L Sigaud e E C Montenegro	
PT29	Lucas S Santos	69	Estudo preliminar de impactos de elétrons do aminoácido Alanina, em fase condensada e em matriz isolada	Lucas Simões Santos, Rafael Macedo Sales , Thiago Rodrigues Silveira, Ricardo dos Reis Teixeira Marinho, Frederico Vasconcellos Prudente, Luiz A. Vieira Mendes	

PQ25	Luciano T Costa	90	Combining Molecular Dynamics Simulations and First-principles Calculations to Understand the Structural and Spectroscopy Properties of Ru-based CO ₂ Reduction Electrocatalyst in Aqueous Environment	Luciano T. Costa, Rocío Sánchez-de-Armas, Giane Damas, José Luis L. Silva, Ivan Rivalta, Barbara Brena and C. Moyses Araujo	
PT30	Luis A da Silva	91	Elastic electron scattering from formamide	Luis A. da Silva, M. V. Buk, I. Iga, and Manoel G. P. Homem	
PT31	Luiz C R da Silva	77	Ionização simples e dupla de metano sob impacto de prótons de 0.25-1.5 MeV	<u>Luiz Carlos Rodrigues da Silva</u> , Wania Wolff, Eduardo Montenegro e Hugo de Luna	
PT32	Marcelo Fiori	115	New approach for approximating the continuum wave function by Gaussian basis set	<u>Marcelo Fiori</u>	
PT33	Marcelo Gomes da Silva	97	Total Cross Section for Electrons Colliding with Molecules	D.G. M. da Silva, <u>Marcelo Gomes da Silva</u> , M. J. Brunger, S. Buckman, Maria. C. A. Lopes	
PQ26	Marcelo G Schappo	56	Cluster size distributions of MeV particle induced desorption of frozen water targets described by coalescence growth	<u>M. G. Schappo</u> , Lucio. S. Farenzena and Enio. F. da Silveira	
PT34	Marco A de M Franco	95	Otimização do tempo de aquisição dos espectros LIBS para maximização da correlação entre espectros e concentração de carbono em solo	<u>Marco Aurélio de Menezes Franco</u> , Paulino Ribeiro Villas Boas	
PQ27	Maria Cristina A Lopes	98	Development of a Positron Source	A. N. de Souza, T. M. Casagrande, M. J. Brunger, J. Sullivan, S Buckman, <u>Maria C. A. Lopes</u>	
PT35		99	Partial Ionization Cross Sections for 1-Propanol and 1-Butanol	W. A. D. Pires, K. L. Nixon, R. R. dos Santos, S. Ghosh, M. J. Brunger, <u>Maria C. A. Lopes</u>	
PQ28		100	Total and Partial Ionization Cross Sections for the Primary Alcohols Methanol and Ethanol	W. A. D. Pires, K. L. Nixon, R. R. dos Santos, M. J. Brunger, <u>Maria. C. A. Lopes</u>	

PQ29	Mariana M de Freitas Viana	60	Simulações e análises em busca de melhores resoluções em um Espectrômetro de Massa por Tempo de Voo	<u>Mariana Maria de Freitas Viana</u> , Fabio Zappa e Wilson de S Melo	
PT36	Mateus A M de Paiva	23	Theoretical study of aluminium-magnesium alloy clusters through genetic algorithm	<u>Paiva, Mateus A. M</u> , Peluzo, Barbara. M. T. C. and Galvão, Breno. R. L.	
PT37	Mateus Costa Ramos	103	Um estudo do herbicida picloram através da técnica de espalhamento raman intensificado por superfície (sers)	<u>Mateus Costa Ramos</u>	
PT38	Mateus G Rocha	43	Cálculo de propriedades eletrônicas em diatômicas deuteradas	<u>Mateus B. Rocha</u> , José R. Mohallem e Denise Assafrão	
PT39	Mateus Salomão	61	Estudo de um Monocromador Trocoidal através da simulação computacional	<u>Mateus Salomão</u> , Fabio Zappa e Wilson de S Melo	
PQ30	Micael D de Andrade	104	Múltiplas Soluções Hartree-Fock de Sistemas Formados por Átomos da Primeira Linha da Tabela Periódica	<u>Micael D. de Andrade</u> , Antonio Moreira de C. Sobrinho e Luiz A. C. Malbouisson	
PQ31	Natalia Ferreira	48	Estudo da distribuição de energia dos fragmentos OH ⁺ e O ⁺ , na dissociação da água por impacto de elétrons	<u>Natalia Ferreira</u> , L Sigaud, E C Montenegro	
PQ32	Nicolau A S Rodrigues	82	Emission spectra of plasma produced by laser ablation at water surface	<u>Nicolau.A.S. Rodrigues</u> , J. Amorim Filho, B. Christ , J. Jakutis Neto	
PQ33	Pablo Knoblauch	36	New facilities for molecular spectrometry at Division of laser technology applications of CNEA.	<u>Pablo Knoblauch</u> , D. Fregenal, P.D. Fainstein, J. Fiol, J.D. Fuhr, E. Kaul A. Lamagna, P. Maceira, M. Zarco, E. Zemma	
PT40	Paulo F G Velloso	41	Uma sonda computacional para campos elétricos de moléculas grandes	<u>Paulo Fernando Gomes Velloso</u> , Leonardo Gabriel Diniz, José Rachid Mohallem	
PQ34	Paulo H do Amaral	40	Correções não-adiabáticas aos níveis de energia vibracional de moléculas leves por teoria de átomos em moléculas	<u>Paulo Henrique R. Amaral</u> , José Rachid Mohallem	

PT41	Rafael F C Neves	101	Experimental differential cross sections for electron impact excitation of the electronic bands of furfural	R. F. C. Neves, D. B. Jones, M. J. Brunger and M. C. A. Lopes	
PQ35		102	Differential and integral cross sections for electron impact excitation of vibrational and electronic states in phenol	R. F. C. Neves, D. B. Jones, M. J. Brunger, H. V. Duque and M. C. A. Lopes	
PQ36	Rafael M Sales	68	Estudo da Degradação da Glicina em Fase Isolada por Impacto de Elétrons.	<u>Rafael Macedo Sales</u> , Lucas Simões Santos, Tiago Rodrigues Silveira, Frederico Vasconcellos Prudente, Luiz Antônio Vieira Mendes, Ricardo dos Reis Teixeira Marinho	
PQ37	Ricardo A de Simone Zanon	108	Uso de LIAD como ferramenta para o aumento da população em MOT de Rb	I. M. Campestrine <u>Ricardo. A. de Simone Zanon</u>	
PT42		109	Estudo das taxas de perdas em uma armadilha magneto-óptica: Casos homonuclear e heteronuclear	Ulbrich Kelli. F, Oliveira A.L , Farias K.M. e <u>Zanon, Ricardo .A. de Simone</u>	
PQ38	Ricardo R. Oliveira	6	Adsorption and infrared analysis of acrylic acid over Mo2C	<u>Ricardo R. Oliveira</u> e Alexandre B. Rocha	
PT43	Roberto R Pinho	59	Estudo da Cinética Química de Fotorresinas Expostas à Radiação Ultravioleta Utilizando a Técnica LDI – TOF MS	J.S. Martins, L. A. Esteves, Fabio. Zappa, Wilson. S. Melo, Maria. L. M. Rocco, <u>Roberto R. Pinho</u> , C. R. A. Lima	
PT44	Rodrigo C. Pereira	35	IR Spectroscopy and physicochemical effects on astrophysical N2O ice bombarded by energetic ions	A.L.F.de Barros, G.C.Almeida, <u>Rodrigo C.Pereira</u> , Cintia .A.P.da Costa, Enio .F.da Silveira	
PQ39	Romarly F. da Costa	92	Electron collisions with phenol: Total, integral, differential, and momentum transfer cross sections and the role of multichannel coupling effects on the elastic channel	<u>Romarly F. da Costa</u> , E. M. de Oliveira, M. H. F. Bettega, M. T. do N. Varella, D. B. Jones, M. J. Brunger, F. Blanco, R. Colmenares, P. Limão-Vieira, G. García nd M. A. P. Lima	

PT45		93	The electron-furfural scattering dynamics for 63 energetically open electronic states	Romarly. F. da Costa, M. T. do N. Varella, M. H. F. Bettega, R. F. C. Neves, M. C. A. Lopes, F. Blanco, G. García, D. B. Jones M. J. Brunger and M. A. P. Lima	
PQ40	Ronan P N dos Santos	114	Estrutura de Íons Moleculares Livres	Ronan P N dos Santos, C.R. de Carvalho, A.B. Rocha , Ginette Jalbert e N.V. de Castro Faria	
PT46	Thiago Monfredini	75	Molecular ion spectroscopy in the protostar NGC 1333-IRAS 4A	Thiago Monfredini, Bertrand Lefloch and Heloísa M. Boechat-Roberty	
PQ41	Tiago R Silveira	58	Determinação das Secções de Choque (σ) da Prolina, Ácidos Ascórbico e a Misturas Entre Eles, Induzidos por Íons Energéticos de (H ⁺)	Tiago R. Silveira, Luiz A. V. Mendes Ricardo R. T. Marinho e Enio F. Silveira	
PT47	Vitor L B de Jesus	51	Um novo espectrômetro de massa por tempo de voo com dupla focalização para medidas de seção de choque absolutas de íons positivos de recuo	L Sigaud, V L B de Jesus, Natalia Ferreira e E C Montenegro	
PQ42	Wallas S Nascimento	66	Entropia da informação: um estudo de excitações eletrônicas em sistemas quânticos confinados.	Wallas Santos Nascimento,, Frederico Vasconcellos Prudente	
PT48	Wanderson S de Jesus	67	Estudo da microsolvatação do íon Li ⁺ pelo gás raro Kr: Construção da Superfície de Energia Potencial do Sistema Li ⁺ Kr ₂	Wanderson S. Jesus, Frederico V. Prudente, Jorge M. C. Marques e Francisco B. Pereira	
PQ43	Wania Wolff	76	Fragmentação de H ₂ O por impacto de íons leves nus e vestidos à energias intermediárias	W Wolff , H Luna, R Schuch , D Cariatore, S Otranto, F Turco, D Fregenal, G Bernardi and S Suárez	

PQ44		118	Ionization and fragmentation of the biomolecular analogue tetrahydrofuran by impact of electrons and proton	Wania Wolff · Lucas Sigaud , Eduardo C. Montenegro Benedikt Rudek, Marion Bug ² e Woon Y. Baek	
------	--	-----	---	--	--