

Universidade Federal do Paraná
Setor de Ciências Exatas
Departamento de Física

MEMORIAL DESCRITIVO:

ATIVIDADES DE ENSINO,
PESQUISA, EXTENSÃO, GESTÃO ACADÊMICA
E PRODUÇÃO PROFISSIONAL

Milton Massumi Fujimoto

Memorial Descritivo das Atividades de Ensino, Pesquisa, Extensão, Gestão Acadêmica e Produção Profissional, apresentado à Comissão Especial para avaliação da progressão na carreira de professor universitário da classe de Professor Associado IV para a classe de Titular.

Curitiba
Setembro 2015

Sumário

1. Introdução.....	3
2. Dados Pessoais.....	4
3. Formação Acadêmica.....	5
4. Atuação Profissional.....	6
5. Atividades de Ensino.....	6
5.1.1 Atividades de Ensino na UnB.....	6
5.1.2 Atividades de Ensino na UFPR.....	7
6. Atividades de Orientação.....	7
6.1 Co-orientações concluídas de alunos de Doutorado:.....	7
6.2 Orientações concluídas de alunos de Iniciação Científica:.....	8
6.3 Orientações em andamento de alunos de Iniciação Científica:.....	9
6.4 Orientações concluídas de alunos de Monitoria:.....	9
6.5 Orientações em andamento de alunos de Monitoria:.....	10
7. Atividades Administrativas.....	10
7.1 Coordenador do Curso de graduação do curso de Licenciatura em Química da UnB.....	10
7.2 Vice-coordenador do Programa de Pós-Graduação em Física da UFPR.....	10
7.3 Coordenador da Disciplina de Física Experimental I.....	10
7.4 Membro de colegiado de curso de graduação e Pós.....	11
7.5 Membro de Banca de Avaliação de Estágio Probatório.....	11
7.6 Membro de Comitê Setorial do Setor de Exatas.....	11
7.7 Membro de Banca Avaliadora para Concurso Público.....	12
7.8 Membro de Banca para avaliação de Bolsistas Institucionais.....	12
7.9 Outras Comissões.....	12
8. Atividades de Extensão.....	13
8.1 Coordenação de Projeto de Extensão Universitária.....	13
8.2 Participação em Eventos de Extensão universitária.....	13
9. Atividades de produção intelectual.....	13
9.1 Artigos completos publicados em periódicos.....	13
9.2 Resumos publicados em anais de congressos.....	17
9.3 Participação em Eventos Científicos.....	24
9.4 Participação na Organização de Eventos.....	25
9.5 Seminários e Palestras.....	25
9.6 Participação em bancas de trabalhos de conclusão.....	26
9.6.1 Teses de doutorado.....	26
9.6.2 Dissertações de Mestrado.....	28
9.6.3 Qualificações de Doutorado.....	29
9.6.4 Qualificação de Mestrado.....	30
9.5 Atividades de Pesquisa.....	30
9.5.1 Áreas de Pesquisa.....	30
9.5.2 Principais Colaborações Científicas atuais.....	31
9.5.3 Projetos de Pesquisas.....	32
9.5.4 Bolsas de Produtividade CNPq e Pós-Doutorado.....	33
9.5.5 Emissão de Pareceres Ad Hoc.....	33
9.5.6 Citações em Artigos Científicos.....	33
9.5.7 Prêmios.....	34

1. Introdução

Nasci em 22 de janeiro de 1967 em Macaé – RJ, filho de um casal de pequenos agricultores, Shoichi Fujimoto e Chiyoko Fujimoto. Cresci na cidade de Cascavel no estado do Paraná, junto com mais 4 irmãos, Hiroshi, Reinaldo, Inez e Fernando, sendo destes o único a terminar um curso superior. Estudei no ensino primário e ginásial em escolas públicas. O segundo grau, como era chamado, estudei no período noturno, pois trabalhava durante o dia para auxiliar nas despesas em casa. Foi num período onde o ensino médio que antes era chamado de Científico foi substituído pelo Ensino Técnico. Fiz então o curso de Desenho Técnico, no Colégio Estadual Wilson Jofre em Cascavel, no entanto tive bons professores de Biologia, Física e Química, os quais me incentivaram a continuar os estudos e tentar uma faculdade em Curitiba.

Ao término do segundo grau, prestei vestibular para o Curso de Química na Universidade Federal do Paraná em Curitiba. Sendo aprovado, iniciei o Curso de Licenciatura e Bacharelado em Química, em 1985 e terminei no ano de 1989. Durante o período em que cursava a graduação eu ainda não tinha escolhido qual o caminho a seguir, assim, procurei aproveitar para ter o máximo de experiência possível em diferentes áreas, entre as possíveis atividades desenvolvidas na profissão, tais como: bolsista de extensão para o desenvolvimento de experimentos didáticos, estagiário de Química na indústria, bolsista de iniciação científica e lecionei em cursinhos preparatórios e em escola particular. Embora no Departamento de Química da UFPR ainda não houvesse um programa de pós-graduação naquele período, recebi o incentivo de alguns dos meus professores para procurar outras instituições para fazer um mestrado.

Após me formar como Bacharel e Licenciado em Química, em 1990, iniciei o mestrado em na área de Físico-Química, no Departamento de Química da Universidade de São Carlos - UFSCar-SP, sob a orientação do Prof. Dr. Lee Mu-Tao e bolsa do CNPq. O estudo desenvolvido foi na área de espalhamento de elétrons com moléculas. Defendi o mestrado em 1993, no mesmo ano em que iniciei o doutorado como bolsista da FAPESP também na Universidade Federal de São Carlos. Durante o doutoramento implementei computacionalmente o método das frações continuadas para resolver as equações de espalhamento de elétrons por moléculas lineares. A minha interação com o prof. Lee Mu-Tao foi muito proveitosa para minha carreira, além da sua alta competência e objetividade nos projetos realizados, tivemos um relacionamento de muito respeito e amizade que pode ser verificada também pelas continuidade da nossa cooperação ao longo dos anos, mesmo após o término do doutorado.

Logo após defender a tese de doutorado em 1996, prestei um concurso para professor

Assistente no Departamento de Química da Universidade de Brasília – UnB, em Brasília, e iniciei a minha atividade profissional como professor da área de Físico-Química, lecionei disciplinas teóricas e experimentais de laboratório. Embora as condições de trabalho para a realização dos meus projetos de pesquisa estavam começando a se estruturar e o relacionamento com os colegas de universidade era ótimo, a minha esposa estranhava o fato de Brasília ser uma cidade muito diferente das que ela conhecia. Então por razões familiares prestei um novo concurso para professor, desta vez no departamento de Física da Universidade Federal do Paraná, e iniciei as minhas atividades no ano de 1999, onde venho exercendo as minhas atividades de professor até o presente momento.

Em Julho de 2011 eu me afastei por um ano para a realização de um estágio de pós-doutorado na University College London - UCL, em Londres, na Inglaterra, sob a supervisão do prof. Jonathan Tennyson. Período que aproveitei para conhecer o método da matriz-R e aplicá-lo ao espalhamento de elétrons moléculas de interesse biológico. A interação com o prof. Tennyson foi muito e proveitosa interessante, tanto pela sua competência, objetividade quanto por ser uma pessoa de fácil convivência. Apesar de exercer liderança de vários grupos de pesquisa, ter que trabalhar em vários projetos ao mesmo tempo e discutir diferentes temas com várias pessoas diariamente, possui uma grande capacidade de administrar o seu tempo e ainda assim, tínhamos tempo para uma discussão de trabalho semanalmente. A convivência com ele fora da Universidade me fez nutrir uma simpatia pelo Tottenham Hotspurs Football Club.

A seguir apresento um detalhamento das atividades realizadas durante essa trajetória.

Informações suprimidas em decorrência da Lei
Geral de Proteção de Dados Pessoais (LGPD)
- Lei nº 13.709, de 14 de agosto de 2018.

Informações suprimidas em decorrência da Lei
Geral de Proteção de Dados Pessoais (LGPD)
- Lei nº 13.709, de 14 de agosto de 2018.

Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas, Departamento de Física. Centro Politécnico - Jardim das Américas, 81.531-990 - Curitiba, PR - Brasil -Caixa Postal: 19044
Telefone:(41)3361-3091 Fax: (41) 3361-3418.

3. Formação Acadêmica

Graduação:

1985 – 1989 Graduação em Licenciatura e Bacharelado em Química.
Universidade Federal do Paraná, UFPR, Brasil

Mestrado:

1990 – 1993 Mestrado em Química
Universidade Federal de São Carlos, UFSCar, Brasil
Título: Espalhamento de elétrons por um sistema de camada aberta: uma aplicação do método variacional de Schwinger completado com Born para elétron-NO.
Orientador: Prof. Dr. Lee Mu-Tao
Bolsa: CNPq

Doutorado:

1993 - 1996 Doutorado em Química
Universidade Federal de São Carlos, UFSCAR, Brasil.
Título: Aplicação do método de frações contínuas para o espalhamento de elétrons por moléculas lineares.
Orientador: Prof. Dr. Lee Mu-Tao
Bolsa: FAPESP

Estágio de Pós-Doutorado:

2011 - 2012 Estágio de Pesquisa
University College London – UCL, Londres, Reino Unido.
Título: Espalhamento de elétrons por biomoléculas.
Supervisor: Massey Professor of Physics Jonathan Tennyson
Bolsa: CNPq

4. Atuação Profissional

10/1996 – 02/1999 Fui aprovado em Concurso Público para o provimento de uma vaga para professor assistente no **Departamento de Química da Universidade de Brasília - UnB**, na área de Físico-Química. No regime de Dedicção exclusiva DE 40h. Passei a professor adjunto I por titulação logo em seguida.

02/1999 – Atual Fui aprovado em Concurso Público para o provimento de uma vaga para professor Adjunto I no **Departamento de Física da Universidade Federal do Paraná - UFPR**, na área de Espalhamento de Elétrons. No regime de Dedicção exclusiva DE 40h.

Enquadramento Funcional Atual: Professor Associado IV desde Julho de 2013.

5. Atividades de Ensino

5.1.1 Atividades de Ensino na UnB

De 02/1996 a 02/1999, período em que lecionei no departamento de Química da UnB, foram ministradas as disciplinas de caráter teórico e experimental para os cursos de graduação Licenciatura em Química (noturno), Bacharelado em Química (diurno).

Disciplinas Ministradas:

Termodinâmica Básica

Equilíbrio Químico e Soluções

Estrutura de Átomos e Moléculas

Cinética Química

Laboratório de Físico-Química.

Físico-Química I Experimental

5.1.2 Atividades de Ensino na UFPR

Desde 1999, quando ingressei na UFPR, tenho ministrado disciplinas de caráter teórico e experimental para diversos cursos de graduação, a saber: Licenciatura em Física, Bacharelado em Física, Desenho Industrial, Química, Engenharias: Ambiental, Bioprocessos e Biotecnologia, Cartográfica, Civil, Elétrica, Florestal Industrial Madeireira, Mecânica, Produção e Química.

Disciplinas Ministradas:

Física Geral A

Física Geral B

Física Básica A

Física Básica B

Física I

Física II

Física III

Física IV

Física C

Física E

Física Moderna

Estrutura da Matéria

Física Básica Experimental II

Física Experimental I

6. Atividades de Orientação

6.1 Co-orientações concluídas de alunos de Doutorado:

1) Humberto Luz Oliveira. Estudo de Excitação Eletrônica em Moléculas de Camada Aberta. 2008.

Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de Santa Catarina, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Prof. Dr. Sérgio Eduardo Michelin.

2) Luciara Indrusiak Weiss. Estudo dos Efeitos de Absorção no Espalhamento de Elétrons por Moléculas pelo Método de Frações Continuadas. 2013. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de Santa Catarina. Orientador: Prof. Dr. Sérgio Eduardo Michelin.

6.2 Orientações concluídas de alunos de Iniciação Científica:

1) Patrícia Diniz Virmond. Espalhamento Elástico de elétrons por moléculas de CS₂. 1997. Universidade de Brasília. PIBIC-CNPq.

2) Walter Luis Rossigali. Cálculo mecânico-quântico de estrutura molecular. 2000. Universidade Federal do Paraná. PIBIC-CNPq.

3) Ariel Frozza. Cálculo mecânico-quântico de estrutura molecular. 2001. Universidade Federal do Paraná. UFPR-TN.

4) Ariel Frozza. Cálculo do espalhamento elástico de elétrons por moléculas de NO. 2002. Universidade Federal do Paraná, PIBIC-CNPq.

5) Ariel Frozza. Cálculo do espalhamento elástico de elétrons por moléculas de NO. 2003. Universidade Federal do Paraná, PIBIC-CNPq.

6) Thiago Trajano Fabri. Cálculo do espalhamento elástico de elétrons por moléculas de NCO, CNO e NOC. 2004. Universidade Federal do Paraná. Voluntário.

7) Danilo Rodrigues. Estudo teórico da colisão elástica entre elétrons e moléculas de SiC. 2007. Universidade Federal do Paraná. PIBIC-CNPq

8) Danilo Rodrigues. Cálculo do espalhamento elástico de elétrons por moléculas de Si₂. 2008. Universidade Federal do Paraná, Fundação Araucária.

9) Danilo Rodrigues. Espalhamento Elástico de Elétrons por Moléculas de Si₂. 2009. Universidade Federal do Paraná, Fundação Araucária.

10) Alessandra de Souza Barbosa. Estudo teórico da colisão elástica elétron-SiCN. 2011. Universidade Federal do Paraná, PIBIC-CNPq.

11) Erik Vinícius Rodrigues de Lima. Espalhamento de elétrons por moléculas de interesse biológico. 2012. Universidade Federal do Paraná, CAPES.

12) Erik Vinícius Rodrigues de Lima. Espalhamento de elétrons por moléculas de Acetonitrila (CH₃CN). 2013. Iniciação Científica. Universidade Federal do Paraná, Fundação Araucária.

6.3 Orientações em andamento de alunos de Iniciação Científica:

12) Erik Vinícius Rodrigues de Lima. Espalhamento de elétrons por moléculas de interesse biológico. 2013. Iniciação Científica. Universidade Federal do Paraná, Fundação Araucária.

6.4 Orientações concluídas de alunos de Monitoria:

- 1) Mac Dowell Cordeiro Dinda – Disciplina: Física Experimental I – 2003
- 2) Victor Alberto Parcianello Benso – Física Experimental I – 2003.
- 3) Joice Emanuele do Nascimento – Disciplina: Física Experimental I – 2004.
- 4) Mac Dowell Cordeiro Dinda – Disciplina: Física IV – 2004.
- 5) Thiago Trajano Fabri – Disciplina: Física Moderna – 2005.
- 6) Felipe Machado Januckaitis – Disciplina: Física Experimental I – 2005.
- 7) Daniel Ricardo P. Sobrinho – Disciplina: Física Experimental I – 2006.
- 8) Danilo Rodrigues – Disciplina: Física Experimental I – 2006.
- 9) Ana Letícia D'Oliveira Fonseca – Disciplina: Física Experimental I – 2006.
- 10) Jaqueline Miriam Cascaes – Disciplina: Física Experimental I – 2006.
- 11) Bruno Branco Pontarolli – Disciplina: Física Experimental I – 2006.
- 12) Hélio Luiz Augusto Bueno Matos de Almeida – Disciplina: Física IV – 2007.
- 13) Marcelo Silva Custódio – Disciplina: Física IV – 2007.
- 14) Roberto Brusnick – Disciplina: Física IV – 2008.
- 15) Johara Ferreira Pereira – Disciplina: Física Experimental I – 2008.
- 16) Elizabeth Witt – Disciplina: Física Experimental I – 2009.
- 17) Roberto Brusnick – Disciplina: Física Experimental I – 2009.
- 18) Letícia Pavani Pozenato – Disciplina: Física Experimental I – 2010.
- 19) Igor Tauscher Martynez – Disciplina: Física Experimental I – 2010.
- 20) Hermann Franz Degenhardt – Disciplina: Física Experimental I – 2011.
- 21) Zeuza Francisca Souza da Silva – Disciplina: Física IV – 2011.
- 22) Luiza Pivatto – Disciplina: Física Experimental I – 2011.
- 23) Anderson Chan Tam – Disciplina: Física IV – 2013.
- 24) Samuel Carvalho de Souza Leal – Disciplina: Física Experimental I – 2013.
- 25) Nicholas Figueiredo Prestes – Disciplina: Física Experimental I – 2014.

- 26) Jonathan Morris Samara – Disciplina: Física IV – 2014.
27) Paula Kekes Al – Disciplina: Física Experimental I – 2014.
28) Thiago Aparecido Franco – Disciplina: Física IV – 2014.

6.5 Orientações em andamento de alunos de Monitoria:

- 1) Juvenal Vitor Tavares Correia – Disciplina: Física Experimental I – 2015.
2) Matheus Bacigalupo Kiataki – Disciplina: Estrutura da Matéria – 2015.

7. Atividades Administrativas

7.1 Coordenador do Curso de graduação do curso de Licenciatura em Química da UnB

Durante o período de 06/1998 a 02/1999 atuei como coordenador do curso de Licenciatura em Química do Instituto de Química da UnB, participando como membro do colegiado no IQ-UnB, bem como representante na Câmara de Carreira Docente do IQ-UnB e representação no Instituto de Ciências Exatas.

7.2 Vice-coordenador do Programa de Pós-Graduação em Física da UFPR

Durante o período de 12/2006 a 12/2008 atuei como vice-coordenador do programa de Física. Entre as atribuições participando como representante no Colegiado da pós-graduação, Câmara Departamental e no Conselho Setorial do Setor de Exatas.

7.3 Coordenador da Disciplina de Física Experimental I

Durante o Período de 2007 a 2009 fui coordenador da disciplina de Física experimental I. Este é um cargo que oficialmente não existe para o departamento e para a Universidade, mas requer muita energia e dedicação em prol do Departamento de Física. Uma vez que o coordenador tem que gerenciar todo o semestre uma equipe de cerca de 5 a 7 professores, garantir que cerca de 11 a 14 turmas que cursam essa disciplina, correspondendo a uns 300 alunos/semestre, tenham a mesma

programação de conteúdo e que a prova seja realizada de forma unificada, todos no mesmo dia e horário. Exige-se uma capacidade de organização e planejamento que se concentra principalmente nas atividades do coordenador.

7.4 Membro de colegiado de curso de graduação e Pós

- 1) Membro de Colegiado da Pós-graduação em Física 2006-2008, 2010-2011.
- 2) Representante do Departamento de Física no colegiado de Curso de Desenho industrial no período de 1999-2000, 2003-2004.
- 3) Representante no colegiado de Curso de Física no período de 2000, 2002.
- 4) Membro da comissão de Reforma Curricular do Curso de Física.
- 5) Representante do Departamento de Física no colegiado de Curso de Engenharia Cartográfica no período de 2001.
- 6) Representante do Departamento de Física no colegiado de Curso de Engenharia Elétrica no período de 2002, 2005-2006.
- 7) Representante do Departamento de Física no colegiado de Curso de Engenharia Florestal no período de 2005.
- 8) Representante do Departamento de Física no colegiado de Curso de Engenharia de Bioprocessos e Biotecnologia no período de 2006-2011.
- 9) Representante do Departamento de Física no colegiado de Curso de Engenharia Industrial Madeireira no período de 2014-2015.

7.5 Membro de Banca de Avaliação de Estágio Probatório

- 1) Membro de Banca de Avaliação de Estágio Probatório indicado pelo Setor de Ciências Exatas para avaliação da docente Lucimara Stolz Roman do Departamento de Física em 2003.
Membro de Banca de Avaliação de Estágio Probatório indicado pelo Setor de Ciências Exatas para avaliação do docente José Varalda do Departamento de Física em 2008.
- 2) Membro de Banca de Avaliação de Estágio Probatório indicado pelo Setor de Ciências Exatas para avaliação do docente Andersson Barison do Departamento de Química em 2009.
- 3) Membro de Banca de Avaliação de Estágio Probatório indicado pelo Departamento de Física para avaliação do docente Sergio Sanches do Departamento de Física em 2011.
- 4) Membro de Banca de Avaliação de Estágio Probatório indicado pelo Setor de Ciências Exatas para avaliação da docente Fernanda Bühler Rizzato do Departamento de Estatística em 2013.

7.6 Membro de Comitê Setorial do Setor de Exatas

- 1) Representante no Comitê Setorial do Setor de Ciências Exatas devido ao cargo de Vice-

Coordenador da pós-graduação em Física no período 2006-2008.

2) Membro do Comitê Setorial de Monitoria do Setor de Exatas 2006-2008, 2008-2010, 2012- 2014 e 2014 até a presente data.

7.7 Membro de Banca Avaliadora para Concurso Público

1) Membro de Banca examinadora para provimento de uma vaga de Professor Substituto para o Departamento de Física da UFPR em 2005, 2007, 2010.

2) Membro de Banca examinadora para provimento de uma vaga de Professor Adjunto para o Departamento de Física da Universidade Federal de Juiz de Fora em 2009.

3) Membro de comissão Avaliadora da prova prática para o provimento de uma vaga para Técnico de Laboratório/Física em 2009.

4) Membro de Comissão de Análise das inscrições para provimento de uma vaga de Professor Adjunto para o Departamento de Física da UFPR em 2010.

7.8 Membro de Banca para avaliação de Bolsistas Institucionais

1) Membro de banca examinadora para a seleção de bolsistas de monitoria para as disciplinas do Departamento de Física em 2004-2007, 2009-2010, 2013-2014.

2) Membro de banca examinadora para a seleção de bolsistas de Mestrado/Doutorado para o Programa de Pós-graduação em Física em 2007, 2010, 2011, 2013.

3) Membro de Comissão de seleção de Bolsistas do Projeto Licenciatura 2005 intitulado “Produção de um texto eletrônico sobre Experimentos de Física”.

7.9 Outras Comissões

1) Membro de comissão de Sindicância indicado pela Chefia do Departamento de Física em 2004.

2) Membro de Comissão Avaliadora do Programa de Iniciação Científica da UFPR, durante o 14º. EVINCI em 2006.

3) Membro de Comissão para a reestruturação das disciplinas de Física Teórica ofertadas pelo Departamento de Física.

8. Atividades de Extensão

8.1 Coordenação de Projeto de Extensão Universitária

1) **Coordenador do projeto intitulado “Programa de Capacitação de Professores de Física do Ensino Médio e Fundamental - PARFOR”**. Convênio assinado entre a Fundação Universidade Federal do Paraná (FUNPAR) e a Universidade do professor, órgão vinculado à Secretaria da Educação do Estado do Paraná (SEED-PR), com a finalidade de capacitar os professores da rede básica de ensino, através de cursos modulares de 40h que atingiam até uma máximo de carga horária correspondente ao Nível de Aperfeiçoamento. Durante o Período de 2000-2001.

2) **Coordenador do Curso de Segunda Licenciatura em Física da UFPR-PARFOR**. É um Curso de Capacitação dos professores da rede básica de Ensino, através de um convênio entre CAPES, UFPR e SEED-PR e visa a formação específica de professores que estão lecionando Física na rede pública, mas que não possuem a formação em Física. Atuação como coordenador desde 2013 até a presente data.

8.2 Participação em Eventos de Extensão universitária.

1) Participação no Evento “Um passeio pelo Setor de Ciências Exatas da UFPR”, organizado pelo setor de Ciências Exatas em 1999.

2) Palestra intitulada “A teoria Atômica” ministrada no curso de extensão universitária do Departamento de Física denominado “Visões da Física” em 1999.

3) Professor no curso de Capacitação em Física, intitulado “Entendendo a Física do cotidiano I”, vinculado ao Programa de Capacitação de Professores de Física do Ensino Médio em Fundamental, no ano de 2001.

4) Coordenador da mesa redonda intitulada “Ensinar Física” no Evento de Extensão Universitária “O professor em debate: Música, Sociologia, Física e os desafios da rede pública de Educação”, vinculado à Pro-Reitoria de Graduação da UFPR, em 2014.

9. Atividades de produção intelectual

9.1 Artigos completos publicados em periódicos

1. **FUJIMOTO, MILTON M. ; DE LIMA, ERIK V. R. ; TENNYSON, JONATHAN** . Elastic scattering of low-energy electrons by CH₃CN and CH₃NC molecules. The European Physical

Journal. D, Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics (Online), v. 69, p. 153, 2015.

2. **FUJIMOTO, MILTON M.** ; TENNYSON, JONATHAN ; MICHELIN, Sergio E. . Low-energy electron collisions with the alanine molecule. The European Physical Journal. D, Atomic, Molecular and Optical Physics (Print), v. 68, p. 67, 2014. Citações:3

3. **FUJIMOTO, M. M.** ; WILL J. BRIGG ; TENNYSON, J. . R-matrix calculations of differential and integral cross sections for low-energy electron collisions with ethanol. The European Physical Journal. D, Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics (Online), v. 66, p. 204, 2012. Citações:3

4. JAMES J. MUNRO ; STEPHEN HARRISON ; **FUJIMOTO, M. M.** ; TENNYSON, J. . A dissociative electron attachment cross-section estimator. Journal of Physics. Conference Series (Online), v. 388, p. 012013, 2012. Citações:3

5. **FUJIMOTO, M. M.** ; MICHELIN, S. E. ; ARRETCHE F ; MAZON, K. T. ; LEE, M.-T. ; IGA, I. . Spin-Exchange Effects in Elastic Electron Scattering from Linear Triatomic Radicals. Journal of the Brazilian Chemical Society (Online), v. 21, p. 226-233, 2010.

6. ARRETCHE, F. ; TENFEN, W. ; MAZON, K.T. ; MICHELIN, S.E. ; LIMA, M.A.P. ; LEE, M.-T. ; MACHADO, L.E. ; **FUJIMOTO, M.M.** ; PESSOA, O.A. . Low energy scattering of positrons by H₂O. Nuclear Instruments & Methods in Physics Research. Section B, Beam Interactions with Materials and Atoms (Print), v. 268, p. 178-182, 2010. Citações:1|2

7. MAZON, K. ; TENFEN, W. ; MICHELIN, S. ; ARRETCHE, F. ; LEE, M.-T. ; **FUJIMOTO, M.M.** . Vibrational cross sections for positron scattering by nitrogen molecules. Physical Review. A, v. 82, p. 032704, 2010. Citações:4|3

8. MICHELIN, S.E. ; MAZON, K.T. ; ARRETCHE, F. ; TENFEN, W. ; OLIVEIRA, H.L. ; FALCK, A.S. ; SCOPEL, M.A. ; **FUJIMOTO, M.M.** ; IGA, I. ; FUJIMOTO, M. M. . Comparative study of electron-impact C(1s) core-excitation processes in C₂ and C₂N₂ molecules. Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, v. 171, p. 30-36, 2009.

9. ARRETCHE, F ; MAZON, K ; MICHELIN, S ; **FUJIMOTO, M. M.** ; IGA, I ; LEE, M-T. . Low energy elastic scattering of positrons by CO: An application of continued fractions and Schwinger variational iterative methods. Nuclear Instruments & Methods in Physics Research. Section B. Beam Interactions with Materials and Atoms, v. 266, p. 441-446, 2008. Citações:6

10. ARRETCHE, F ; MAZON, K T ; FALCK, A S ; MARIN, A ; OLIVEIRA, H L ; PESSOA, O A ; TRAVESSINI, D ; MICHELIN, S E ; **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M T . Core-excitation processes of O(1s) in CO, CO₂ and OCS molecules by electron impact . Journal of Physics. Conference Series (Online), v. 115, p. 012007, 2008.

11. **FUJIMOTO, M. M.** ; MICHELIN, S. E. ; MAZON, KAHIO T. ; SANTOS, A. M. ; OLIVEIRA, HUMBERTO LUZ ; LEE, M.-T. . Comparative study of elastic electron collisions on the isoelectronic SiN₂, SiCO, and CSiO radicals. Physical Review. A, v. 76, p. 012709, 2007.

12. MICHELIN, S E ; ARRETCHE, F ; MAZON, K T ; PIACENTINI, J J ; MARIN, A ; OLIVEIRA, H L ; TRAVESSINI, D ; LEE, M-T ; IGA, I ; **FUJIMOTO, M. M.** . Study of inner-shell excitation processes from N(1s) orbitals in N₂O molecules by electron impact . Journal of Physics. B, Atomic, Molecular and Optical Physics, v. 40, p. 4333-4345, 2007.
Citações:1
13. **FUJIMOTO, M. M.** ; MICHELIN, S. E. ; IGA, I. ; LEE, M.-T. . Spin-exchange effects in elastic electron-radical collisions. Physical Review. A, v. 73, n.012714, p. 012714, 2006.
Citações:3|3
14. MICHELIN, S. E. ; FALCK, A. S. ; MAZON, K. T. ; PIACENTINI, J. J. ; SCOPEL, M. A. ; DA SILVA, L. S. S. ; OLIVEIRA, H. L. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; IGA, I. ; LEE, M.-T. . Comparative study for elastic electron collisions on C₂N₂ isomers. Physical Review. A, v. 74, p. 022702, 2006.
Citações:2
15. MICHELIN, S. E. ; OLIVEIRA, HUMBERTO LUZ ; SOARES, L L S ; WEITEINHEIMER, EDUARDO ; LUZ, C A R ; MAZON, KAHIO T. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M.-T. . Cross Section for electron-C₂ collisions. Chemical Physics, Holanda, v. 309, n.2-3, p. 177-182, 2005.
Citações:6|7
16. OLIVEIRA, HUMBERTO LUZ ; MICHELIN, S. E. ; KROIN, T. ; SOARES, L L S ; WEITEINHEIMER, EDUARDO ; LUZ, C A R ; LIMA, M F ; **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M.-T. . A comparative study for elastic electron collisions on the isoelectronic CNN, NCN, and CCO. Journal of Chemical Physics, v. 122, n.094309, 2005.
17. MICHELIN, SERGIO E. ; PESSOA, O ; OLIVEIRA, HUMBERTO LUZ ; WEITEINHEIMER, EDUARDO ; SANTOS, A M S ; **FUJIMOTO, M. M.** ; IGA, I. ; LEE, M.-T. . Inner-shell Excitation of acetylene by electron impact. Physical Review. A, v. 72, n.022730, 2005.
18. **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M.-T. ; MICHELIN, S. E. . Vibrational elastic and excitation cross-sections for electron nitric oxide collisions. Journal of Molecular Structure. Theochem, Holanda, v. 671, n.1-3, p. 59-66, 2004.
19. **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M.-T. ; MICHELIN, S. E. . Elastic cross sections for electron-ketenylidene (C₂O) collisions. Physical Review. A, AMERICAN PHYSICAL SOC, EUA, v. 69, n.052706, p. 52706, 2004.
Citações:4
20. MACHADO, A. M. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; TAVEIRA, A. M. A. ; BRESCANSIN, L. M. ; LEE, M.-T. . Application of the method of continued fractions to multichannel studies on electronic excitation of H₂ by electron impact. Physical Review A, v. 63, n.032707, 2001.
Citações:9
21. LEE, M.-T ; R.FUJIWARA ; MAZON, KAHIO T. ; **FUJIMOTO, M. M.** . The role played by electrons electronic correlations of target of the vibrational excitation cross sections of H₂ by electron impact. Journal of Molecular Structure, Holanda, v. 541, p. 51-57, 2001.
22. **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M.-T. . Elastic and absorption cross sections for electron-nitric oxide collisions. Journal of Physics B - Atomic Molecular and Optical Physics, v. 33, p. 4759-4768,

2000.

Citações:7|8

23. MACHADO, L. E. ; E. M. S. RIBEIRO ; LEE, M.-T. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; BRESCANSIN, L. M. . Cross Sections and polarization fractions for elastic electron-O₂ collisions. Physical Review. A, US, v. 60, n.2, p. 1199-1205, 1999.

Citações:24|24

24. LEE, M.-T. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; IGA, I. . Electronic excitation of the $a^3\Sigma^+ / c^3\Pi_u$ states of H₂ by electron impact using the method of continued fractions. Journal of Molecular Structure (Print), Amsterdam, v. 432, p. 197-209, 1998.

25. LEE, M.-T. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; IGA, I. . Application Of The Method Of Continued Fractions For Low-Energy Scattering By Hydrogen Molecule. Journal of Molecular Structure (Print), Amsterdam, v. 394, p. 117-125, 1997.

26. LEE, M.-T. ; TAVEIRA, A. M. A. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; MACHADO, L. E. ; BRESCANSIN, L. M. . Vibronic Excitation Cross Sections For The $X^1\Sigma^+ / G^1\Pi_u (V=0) \rightarrow C^1\Pi_u (V'=0,1,2,3)$ Transitions In The H₂ Byelectron Impact. Journal of Molecular Structure, Amsterdam, v. 394, p. 127-133, 1997.

27. LEE, M.-T. ; KROIN, T. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; IGA, I. . Second-Order Distorted-Wave Study For Low-Energy And Intermediate- Energy Elastic Electron Scatterig By Hydrogen Molecule. Journal of Physics B - Atomic Molecular and Optical Physics, v. 30, p. L221-L229, 1997.

28. LEE, M.-T. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; IGA, I. . Electronic Excitation Of $B^3\Sigma^+ / U^3\Sigma^+$ State Of H₂ By Eletron Impact Using The Method Of Continued Fractions. J. PHYS. B: AT. MOL. OPT. PHYS., v. 29, p. 425-431, 1996.

29. LEE, M.-T. ; MACHADO, A. M. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; BRESCANSIN, L. M. . Distorted-Wave Study Of Electronic Excitation To Some Low-Lying Statesof CO By Electron Impact. J. PHYS. B: AT. MOL. OPT. PHYS., v. 29, p. 4285-4301, 1996.

30. LEE, M.-T. ; IGA, I. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; LARA, O. . Application Of The Method Of Continued Fractions For Electron Scattering By Linear Molecules. Journal of Physics. B, Atomic Molecular and Optical Physics (Print), Londres, v. 28, p. 3325-3334, 1995.

Citações:13

31. LEE, M.-T. ; IGA, I. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; LARA, O. . The Method Of Continued Fractions For Electron (Positron)-Atom Scattering. J. PHYS. B: AT. MOL. OPT. PHYS., v. 28, p. 299-305, 1995.

32. LEE, M.-T. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; MICHELIN, S. E. ; MACHADO, L. E. . Elastic Electron Scattering By Open-Shell Systems: An Application To E^+ / NO . J. PHYS. B: AT. MOL. OPT. PHYS., v. 25, p. 505-510, 1992.

9.2 Resumos publicados em anais de congressos

1. **FUJIMOTO, M.M.** . R-Matrix Method applied to electron scattering by biomolecules. In: V SeedMol - Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular, 2014, Pirenópolis. V SeedMol - Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular, 2014.
2. **FUJIMOTO, M.M.** ; TENNYSON, J. ; MICHELIN, SERGIO E. . Low energy Electron Collisions with conformers of Alanine. In: XXXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2014, Costa do Sauípe, BA. XXXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2014.
3. **FUJIMOTO, M.M.** ; TENNYSON, J. ; HILL, C. . VAMDC: The Virtual Atomic and Molecular Data Centre. In: XXXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2014, Costa do Sauípe, BA. XXXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2014.
4. **FUJIMOTO, M.M.** ; TENNYSON, J. ; MICHELIN, SERGIO E. . Low energy electron collisions with alanine molecules in gas phase. In: 17º SIMPÓSIO BRASILEIRO DE QUÍMICA TEÓRICA, 2013, Angra dos Reis - RJ. 17º SIMPÓSIO BRASILEIRO DE QUÍMICA TEÓRICA, 2013.
5. HILL, C. ; **FUJIMOTO, M.M.** . VAMDC: The Virtual Atomic and Molecular Data Centre. In: 17º SIMPÓSIO BRASILEIRO DE QUÍMICA TEÓRICA, 2013, Angra dos Reis - RJ. 17º SIMPÓSIO BRASILEIRO DE QUÍMICA TEÓRICA, 2013.
6. **FUJIMOTO, M.M.** ; TENNYSON, J. . R-Matrix calculation for low energy electron collisions in gas phase Glycine. In: XXXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2013, Águas de Lindóia, SP. XXXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2013.
7. HILL, C. ; **FUJIMOTO, M.M.** ; TENNYSON, J. . VAMDC: The Virtual Atomic and Molecular Data Centre. In: XXXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2013, Águas de Lindóia, SP. XXXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2013. v. 1.
8. MICHELIN, S. E. ; FALCK, A.S. ; TRAVESSINI, D ; MAZON, K. T. ; OLIVEIRA, H.L. ;

ARRETCHE F ; MARIN, A ; PESSOA, O ; **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M.-T. . Comparative Study of Core-Excitation Processes of O(1s) in CO₂, OCS and CO Molecules by Electron Impact. In: XV International Symposium on Electro-Molecule Collisions and Swarms, 2007, Belfast. XV International Symposium on Electro-Molecule Collisions and Swarms, 2007.

9. MAZON, K. T. ; ARRETCHE, F. ; MICHELIN, S. E. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M.-T. . Vibrational Excitation of N₂ by Positron Impact.. In: XIV International Workshop on Low Energy Positron and Positronium Physics, 2007, Belfast. XIV International Workshop on Low Energy Positron and Positronium Physics, 2007.

10. **FUJIMOTO, M. M.** ; MICHELIN, S. E. ; LEE, M.-T. . Efeito de troca de spin na colisão elástica de elétron por moléculas de SiNN. In: XXVIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2006, São Lourenço. XXVIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2006. v. 1.

11. **FUJIMOTO, M. M.** ; MICHELIN, S. E. ; LEE, M.-T. . ELASTIC CROSS SECTIONS OF ELECTRON SCATTERING BY TRIATOMIC OPEN SHELL MOLECULES: SiCO, CSiO AND SiNN. In: International Conference on Photonic Electronic and Atomic Collisions, 2005, Rosário. XXIV International Conference on Photonic Electronic and Atomic Collisions, 2005.

12. **FUJIMOTO, M. M.** ; MICHELIN, SERGIO E. ; LEE, M.-T. . SPINFLIP CROSS SECTIONS AND POLARIZATION FRACTION OF CCO RADICAL BY ELECTRON IMPACT. In: International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, 2005, Campinas. XIV International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, 2005. v. 1. p. 82-82.

13. OLIVEIRA, HUMBERTO LUZ ; SOARES, L L S ; MICHELIN, SERGIO E. ; MAZON, KAHIO T. ; FALCK, ADRIANE S ; SCOPEL, M A ; PIACENTINI, J J ; **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M.-T. . Inner-shell excitation of N 1(s) in N₂O molecule by electron impact. In: International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, 2005, Campinas. XIV International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, 2005. v. 1. p. 62-62.

14. SOARES, L L S ; MICHELIN, SERGIO E. ; OLIVEIRA, HUMBERTO LUZ ; SANTOS, A M S ; PIACENTINI, J J ; **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M.-T. . Core excitation processes of C1(s) in C₂ and C₂H₂ molecules by electron impact. In: International Symposium on Electron-Molecule

Collisions and Swarms, 2005, Campinas. XIV International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, 2005. v. 1. p. 75-75.

15. SCOPEL, M A ; SOARES, L L S ; MICHELIN, SERGIO E. ; FALCK, ADRIANE S ; OLIVEIRA, HUMBERTO LUZ ; MAZON, KAHIO T. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M.-T. . A comparative study for elastic electron collisions on the C₂N₂ and their isomers CNCN, CCNN and CNNC. In: International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, 2005, Campinas. XIV International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, 2005. v. 1. p. 76-76.

16. MICHELIN, SERGIO E. ; FALCK, ADRIANE S ; SCOPEL, M A ; PIACENTINI, J J ; OLIVEIRA, HUMBERTO LUZ ; MAZON, KAHIO T. ; SANTOS, A M S ; **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M.-T. . Excitation of Inner-shell states of C₂H₂ and C₂N₂ polyatomic molecules by electron impact. In: International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, 2005, Campinas. XIV International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, 2005. v. 1. p. 87-87.

17. **FUJIMOTO, M. M.** ; MICHELIN, S. E. ; LEE, M.-T. . Seção de choque da colisão de elétrons com moléculas interestelares. In: XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2005, São Pedro. XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica - Livro de Resumos, 2005. v. 1. p. 162-162.

18. **FUJIMOTO, M. M.** ; FROZZA, ARIEL ; MICHELIN, S. E. ; LEE, M.-T. . Estudo Teórico do Efeito Isômero na comparação da seção de choque elástica para as moléculas de NCO, CNO e NOC por impacto de elétrons. In: XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2004, Poços de Caldas - MG. XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2004. v. 1. p. 415-415.

19. **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M.-T. ; MICHELIN, S. E. . Estudo Teórico da Seção de Choque Elástica para a Molécula de CCO na colisão com elétrons. In: XXVI Encontro Nacional da Física da Matéria Condensada - ENFMC, 2003, Caxambú- MG. XXVI Encontro Nacional da Física da Matéria Condensada - ENFMC, 2003. v. 1. p. 64-64.

20. FROZZA, ARIEL ; **FUJIMOTO, M. M.** . Seção de choque elástica para a molécula de NCO por impacto de elétrons na faixa de energias baixa e intermediária. In: XXVI Encontro Nacional da Física da Matéria Condensada - ENFMC, 2003, Caxambú-MG. XXVI Encontro Nacional da Física

da Matéria Condensada - ENFMC, 2003. v. 1. p. 64-64.

21. **FUJIMOTO, M. M.** ; MICHELIN, S. E. ; LEE, M.-T. . Estudo Teórico da Colisão Elástica entre elétrons e Moléculas Isoeletrônicas: SiCO, CSiO e SiNN. In: SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA, 2003, Caxambu. XII SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA: Livro de Resumos, 2003. p. P162-P162.

22. WEITEINHEIMER, EDUARDO ; MICHELIN, S. E. ; FALCK, ADRIANE S ; CASTRO, ELISÂNGELA A Y ; PESSOA, O ; OLIVEIRA, HUMBERTO LUZ ; **FUJIMOTO, M. M.** ; JORGE, MANOEL V ; SOARES, LUIZ S ; LEE, M.-T. . Comparative Study for Elastic Processes in CCO and CNN Radicals by Electron Impact. In: SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA, 2003, Caxambu. XII SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA, 2003. p. P144-P144.

23. WEITEINHEIMER, EDUARDO ; MICHELIN, S. E. ; FALCK, ADRIANE S ; CASTRO, ELISÂNGELA A Y ; PESSOA, O ; OLIVEIRA, HUMBERTO LUZ ; **FUJIMOTO, M. M.** ; JORGE, MANOEL V ; SOARES, LUIZ S ; LEE, M.-T. . Cálculo das seções de choque para excitação eletrônica de camadas internas da molécula de CO. In: SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA, 2003, Caxambu. XII SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA, 2003. p. P145-P145.

24. FROZZA, ARIEL ; **FUJIMOTO, M. M.** . Seção de choque diferencial para a excitação vibracional de NO por impacto de elétrons. In: XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2002, São Lourenço. XXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2002. v. 01. p. 38-38.

25. **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M.-T. . A seção de choque de colisão elástica elétron-NO: Estudo comparativo entre função de onda molecular ROHF e UHF. In: XXV ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA, 2002, Caxambu- MG. XXV ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA, 2002. v. 01. p. 40-40.

26. **FUJIMOTO, M. M.** ; FROZZA, ARIEL . Estudo teórico da seção de choque diferencial para a excitação vibracional e rovibracional de NO por impacto de elétrons. In: XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2001, Caxambu, 2001. v. 1. p. 1-1.

27. LEE, M.-T. ; R.FUJIWARA ; MAZON, KAHIO T. ; **FUJIMOTO, M. M.** . Role played by electronic correlation of target on the vibrational excitation cross sections of H₂ by electron impact. In: XXI ICPEAC, 1999, Tokio. International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms. Tokio, 1999. v. 1. p. 141-141.
28. **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M.-T. . SECÇÃO DE CHOQUE NO ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS POR MOLÉCULAS DE NO INCLUINDO EFEITOS DE POLARIZAÇÃO E ABSORÇÃO.. In: Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 1999, Caxambu. X simpósio Brasileiro de Química Teórica, 1999. v. 1. p. 1-1.
29. LEE, M.-T. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; IGA, I. . Electronic Excitation Of The A/Sup/+3/Sigma/Sup/+Sub/G And C/Sup/+3/ Pi/Sub/U States Of H₂ By Electron Impact Using The Method Of Continued fractions. In: XX ICPEAC, 1997, viena. International Symposium on electron-Molecule Collisions and Swarms. VIENA, AUSTRIA, 1997. v. 1. p. 1-1.
30. TAVEIRA, A. M. A. ; LEE, M.-T. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; MACHADO, L. E. ; BRESCANSIN, L. M. . Estudo das Excitacoes Vibronicas Em H/Sub 2/ Por Impacto de Eletrons. In: SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA - SBQT, 1995, Caxambu - MG. VIII SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA - SBQT. CAXAMBU - MG, 1995. p. 0-0.
31. IGA, I. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M.-T. . Estudo do Espalhamento Elastico de Eletrons de Baixa Energia Por Molécula de H/Sub 2/ Com O Metodo de Frações Continuas. In: SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA, 1995, Caxambu. VIII SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA - SBQT. CAXAMBU - MG, 1995. v. 1. p. 1-1.
32. LEE, M.-T. ; IGA, I. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; LARA, O. . O Metodo de Fracoes Continuas Aplicado Para O Espalhamento de Eletrons e Positrons Por Atomos. In: SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA - SBQT, 1995, Caxambu. VIII SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA - SBQT. CAXAMBU - MG, 1995. v. 1. p. 1-1.
33. LEE, M.-T. ; IGA, I. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; LARA, O. . O Metodo de Fracoes Continuas Para O Espalhamento de Eletrons Por Moleculas Lineares. In: SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA - SBQT, 1995, Caxambu. VIII SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA -

SBQT. CAXAMBU - MG, 1995. v. 1. p. 1-1.

34. A. L. MONZANI ; MACHADO, L. E. ; LEE, M.-T. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; BRESCANSIN, L. M. . Espalhamento Inelastico de Eletrons Por Moleculas de NO. In: SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA - SBQT, 1995, Caxambu. VIII SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA - SBQT. CAXAMBU - MG, 1995. v. 1. p. 1-1.

35. MACHADO, L. E. ; E. M. S. RIBEIRO ; LEE, M.-T. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; BRESCANSIN, L. M. . Efeito de Spin-Flip Em Espalhamento de Eletrons de Baixas Energias Por Moleculas de Oxigenio. In: SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA - SBQT, 1995. VIII SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA - SBQT. CAXAMBU - MG, 1995. v. 1. p. 1-1.

36. MACHADO, A. M. ; LEE, M.-T. ; MACHADO, L. E. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; BRESCANSIN, L. M. . Seccao de Choque de Excitacao Eletronica da Molecula de CO Por Impacto de Eletrons. In: SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA - SBQT, 1995, Caxambu - MG. VIII SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA - SBQT. CAXAMBU - MG, 1995. v. 1. p. 1-1.

37. LEE, M.-T. ; IGA, I. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; LARA, O. . The Method Of Continued Fractions For Electron Scattering By Linear Molecules. In: XIX ICPEAC, 1995, Whistler. XIX ICPEAC. WHISTLER, BC, CANADA, 1995. v. 1. p. 1-1.

38. MACHADO, L. E. ; E. M. S. RIBEIRO ; LEE, M.-T. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; BRESCANSIN, L. M. . Elastic And Spin-Flip Cross Sections And Polarization Fractions For Low-Energy Electron-O/Sub 2/. In: XIX ICPEAC, 1995, Whistler. XIX ICPEAC. WHISTLER, BC, CANADA, 1995. v. 1. p. 1-1.

39. MACHADO, L. E. ; A. L. MONZANI ; LEE, M.-T. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; BRESCANSIN, L. M. . Electron Impact Excitation Of NO. In: INTERNATIONAL SUMPOSIUM ON ELECTRON AND PHOTON-MOLECULE COLLISIONS, 1995, Berkeley. INTERNATIONAL SUMPOSIUM ON ELECTRON AND PHOTON-MOLECULE COLLISIONS. BERKELEY - CALIFORNIA - EUA, 1995. v. 1. p. 1-1.

40. E. M. S. RIBEIRO ; MACHADO, L. E. ; LEE, M.-T. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; BRESCANSIN,

L. M. . Efeito de Troca de Spin No Espalhamento de Eletrons Por Moleculas de O/Sub 2/. In: XVII ENFMC, 1994, Caxambu. XVII ENAFMC. CAXAMBU - MG, 1994. v. 1. p. 1-1.

41. **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M.-T. ; MACHADO, L. E. ; BRESCANSIN, L. M. ; MICHELIN, S. E. . Efeito de Troca de Spin No Espalhamento Elastico de Eletrons Por Moleculas de NO. In: XVII ENAFMC, 1994, Caxambu - MG. XVII ENFMC. CAXAMBU - MG, 1994. v. 1. p. 1-1.

42. LEE, M.-T. ; **FUJIMOTO, M. M.** ; MICHELIN, S. E. ; MACHADO, L. E. ; BRESCANSIN, L. M. . Estudo da Excitacao X/Sup 1/Sigma/ Sup +/Sub G/ -> B/Sup 1/Sigma/Sup +/Sub U/ de H/Sub 2/ Por Impacto de Eletrons Utilizando O Metodo de Ondas Distorcidas: A Influencia das Bases Na Seccao de Choque. In: XVII ENFMC, 1994, Caxambu. XVII ENFMC. CAXAMBU - MG, 1994. v. 1. p. 1-1.

43. **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M.-T. ; MACHADO, L. E. ; BRESCANSIN, L. M. . Efeito de Troca de Spin No Espalhamento Elastico de Eletrons Por NO. In: VII SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA - SBQT, 1993, Caxambu. VII SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUIMICA TEORICA - SBQT. CAXAMBU - MG, 1993. v. 1. p. 1-1.

44. **FUJIMOTO, M. M.** ; LEE, M.-T. ; MICHELIN, S. E. ; MACHADO, L. E. ; BRESCANSIN, L. M. . Spin Exchange In Elastic Electron-No Collisions. In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM OF ELECTRON COLLISIONS WITH MOLECULES CLUSTERSAND SURFACES, 1993, Londres. INTERNATIONAL SYMPOSIUM OF ELECTRON COLLISIONS WITH MOLECULES CLUSTERSAND SURFACES. LONDRES - INGLATERRA, 1993. v. 1. p. 1-1.

9.3 Participação em Eventos Científicos

1. V SeedMol - Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular, Pirenópolis - GO, 2014.
2. XII Workshop em Física Molecular e Espectroscopia, Brasília - DF, 2014.
3. XXXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Costa do Sauípe - BA -2014.
4. XVII Simpósio Brasileiro de Química Teórica - SBQT, Angra dos Reis - RJ , 2013.
5. XXXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Águas de Lindóia – SP, 2013.
6. Annual Meeting of the SUP@VAMDC project, Milton Keynes - Reino Unido, 2013.
7. X Workshop em Física Molecular e Espectroscopia, Recife - PE, 2012.
8. VIII Workshop em Física Molecular e Espectroscopia, Curitiba - PR, 2010.
9. VII Workshop em Física Molecular e Espectroscopia, Joinville - SC, 2009.
10. XXXI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Águas de Lindóia – SP, 2008.
11. XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica, Poços de Caldas - MG, 2007.
12. XXVIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, São Lourenço - MG, 2006.
13. IV Workshop em Física Molecular e Espectroscopia, Salvador - BA, 2006.
14. XIV International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, Campinas – SP, 2005.
15. XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, São Pedro - SP, 2005.
16. XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Poços de Caldas – MG, 2004.
17. II Workshop em Física Molecular e Espectroscopia, Niterói – RJ, 2004.
18. XXVI Encontro Nacional da Física da Matéria Condensada - ENFMC, Caxambu - MG, 2003.
19. XII Simpósio Brasileiro de Química Teórica - SBQT, Caxambu - MG, 2003.
20. XXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambu- MG, 2002.
21. XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica - SBQT, 2001, Caxambu – MG, 2001.
22. X Simpósio Brasileiro de Química Teórica - SBQT, Caxambu - MG, 1999.
23. VIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica - SBQT. CAXAMBU - MG, 1995.
24. XVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. CAXAMBU - MG, 1994.

25. VII Simpósio Brasileiro de Química Teórica - SBQT. CAXAMBU - MG, 1993.

9.4 Participação na Organização de Eventos

1. Comitê organizador Nacional do XII Workshop de Física Molecular e Espectroscopia. Brasília – DF, 2014.
2. Comitê organizador local do VIII Workshop de Física Molecular e Espectroscopia. Curitiba – PR, 2010.

9.5 Seminários e Palestras

1. Palestra convidada intitulada “ESTUDO TEÓRICO DA COLISÃO ELÁSTICA ENTRE ELÉTRONS E MOLÉCULAS DE CAMADA ABERTA”. In: II Workshop em Física Molecular e Espectroscopia, Niterói – RJ, 2004.
2. Palestra intitulada “Electron collisions with ethanol molecules”. In: Department of Physics of University College London – UCL, 2012.
3. Palestra intitulada “R-Matrix calculation for low energy electron collisions in gas phase Glycine”. In: XXXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Águas de Lindóia – SP, 2013.
4. Palestra intitulada “R-Matrix Method applied to electron scattering by biomolecules”. In: V SeedMol - Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular, Pirenópolis – GO, 2014.

9.6 Participação em bancas de trabalhos de conclusão

9.6.1 Teses de doutorado

1. SILVA, L. C.; VITIELO, S. A. S.; **FUJIMOTO, M.M.**; CASTRO, M. A.; FUFAICAL, L. F. S.. Participação em banca de José Higino Damasceno Junior. Propriedades Eletrônicas e Estruturais de Clusters Metálicos via Métodos ab initio. 2015. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de Goiás.
2. **FUJIMOTO, M.M.**; LEE, M.-t; Machado, L.E.; BRESCANSIN, Luiz M; CASTILHO, A. L.. Participação em banca de Gabriel Luiz Cruz de Souza. Estudo teórico e experimental da interação de Elétrons com Moléculas Poliatômicas. 2010. Tese (Doutorado em Química) - Universidade Federal de São Carlos.
3. XARIPOV, F.; Philippi, P.C.; Figueiredo, W; **FUJIMOTO, M. M.**; VIANA, R. L.. Participação em banca de Denize Kalempa. Modelagem Numérica de Propagação de Ondas em Gases Rarefeitos. 2009. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal do Paraná.
4. MICHELIN, Sergio E.; ALMEIDA, D. P.; **FUJIMOTO, M. M.**; OURIQUES, G. R.; PESSOA, O. Participação em banca de Marcos Araquém Scopel. Método das Ondas Distorcidas Aplicado no Espalhamento Inelástico de Elétrons. 2009. Tese (Doutorado em Física) Curso de Pós-Graduação em Física - UFSC - Universidade Federal de Santa Catarina.
5. Lopes, M.C.A.; **FUJIMOTO, M. M.**. Participação em banca de Helen Silva. Aplicação do Novo Método de Fluxo Relativo na Determinação das Seções de Choque Diferenciais Elásticas para o Espalhamento de Elétrons de Baixa Energia por Álcoois e pela Água. 2009. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de Juiz de Fora.
6. Kremer, G. M.; Castro, T.T.M.; **FUJIMOTO, M. M.**; Liu, I-Shi; Marques Jr, W.. Participação em banca de Adriano Willian da Silva. Fenômenos de transporte, Propagação de Ondas Sonoras e Espalhamento da Luz em Sistemas Gasosos Binários Densos Relativos e Colisões Reativas Inelásticas em Sistemas Gasosos Binários Rarefeitos. 2008. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal do Paraná.

7. Lee, M-T; MICHELIN, S. E.; **FUJIMOTO, M. M.**; BRESCANSIN, L. M.; MACHADO, L. E.. Participação em banca de Elisângela Aparecida y Castro. Modelo de Potencial Ótico Complexo para Estudos de Espalhamento de Elétrons por Moléculas e Radicais Livres. 2008. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de São Carlos.
8. **FUJIMOTO, M. M.**; Jorge F. E.; Moreno, R. R. M; Muniz, E. P.. Participação em banca de Pedro Leite Barbieri. Bases Gaussianas de Qualidade Quádrupla Zeta de Valência para os átomos de H até Ar: Aplicações em cálculos HF,MP2 e DFT de propriedades moleculares. 2007. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal do Espírito Santo.
9. MACHADO, L. E.; **FUJIMOTO, M. M.**; RIBEIRO FILHO, Aurino; IGA, I.; ZANELATTO, Amália L M. Participação em banca de Marias das Graças Reis Martins. Estudos Sobre a inclusão da Correlação Eletrônica do Alvo no Espalhamento Elástico Elétron-Molécula e Sobre a Ionização Molecular por Impacto de Elétrons. 2003. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de São Carlos.
10. **FUJIMOTO, M. M.**; S NETO, Joaquin J; LONGO, Ricardo. Participação em banca de Li Exequiel Espínola López. Cálculo mecânico-quântico do processo colisional reativo $\text{Na_HF} \rightarrow \text{NaF+H}$. 2002. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de Brasília.
11. **FUJIMOTO, M. M.**; MACHADO, Luiz Eugênio; BRESCANSIN, Luiz M; HORNOS, José Eduardo. Participação em banca de Jornandes Jesus Correa. Efeitos de segunda ordem em fotoionização molecular. 1999. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de São Carlos.
12. **FUJIMOTO, M. M.**; S NETO, Joaquin J; MUNDIM, Kleber Carlos; GARGANO, Ricardo; ROCHA FILHO, Tarcisio Marciano da. Participação em banca de Monica Wolf Cadilhe. Métodos de solução de problemas de poucos corpos - coordenadas hiperesféricas e método do elemento finito. 1999. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de Brasília.

9.6.2 Dissertações de Mestrado

1. PRUDENTE, F. V.; CERQUEIRA SOBRINHO, A. M.; **FUJIMOTO, M.M.**. Participação em banca de Elymar Sousa de Oliveira. Aplicação do Método de Funções de Base Radiais no Ajuste de Curvas de Energia Potencial. 2015. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal da Bahia.

2. **FUJIMOTO, M.M.**. Participação em banca de Cristiano Zanlorenzi. Aplicação de métodos de mecânica-quântica no estudo da degradação da atrazina. 2011. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal do Paraná.

3. **FUJIMOTO, M. M.**; Lemos de Sá, E; Rayduke, R.L.A.. Participação em banca de Alexandre Carli de Freitas. Aplicação de métodos de Mecânica-Quântica no estudo do termocromismo de alcóxidos de Vanádio(IV) em solução. 2008. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal do Paraná.

4. MICHELIN, S. E.; **FUJIMOTO, M. M.**; Arretche F. Participação em banca de João José Piacentini. CÁLCULO DAS SEÇÕES DE CHOQUE PARA O ESPALHAMENTO INELÁSTICO DE ELÉTRONS POR MOLÉCULAS DE N₂O. 2007. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Santa Catarina.

5. **FUJIMOTO, M. M.**; Marinelli, J.R.; Avancini, S.S.; Cruz, F. F. S.. Participação em banca de Cezar Augusto Romane Jacob. Aproximação relativística para as densidades de corrente nuclear no espalhamento ($e, e'p$). 2005. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Santa Catarina.

6. MICHELIN, S. E.; **FUJIMOTO, M. M.**; KROIN, T.. Participação em banca de Elisângela Aparecida y Castro. Cálculos das seções de choque diferenciais e integrais para a excitação eletrônica de camadas internas da molécula de C₂H₂. 2003. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Santa Catarina.

7. **FUJIMOTO, M. M.**; BETTEGA, Marcio Henrique F; FERREIRA, Luiz Guimarães. Participação em banca de Emerson Joucoski. Espalhamento elástico de elétrons por moléculas de

NF3 e SnY4 (Y=Cl,Br,I). 2002. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Paraná.

8. FUJIMOTO, M. M.; HUMMELGUEN, Ivo A; NART, Francisco Carlos. Participação em banca de Juliana Yéteka. Características elétricas de filmes pecpe e estudo sobre o PPV nas técnicas de deposição por centrifugação e langmuir-Blodgett. 2000. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Paraná.

9. FUJIMOTO, M. M.; OLIVEIRA NETO, Marçal de; GARCIA, Edgardo. Participação em banca de Glauciete Sarmiento Maciel. Estudo da transferibilidade de cargas parciais para uso em campos de força clássicos. 1999. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade de Brasília.

9.6.3 Qualificações de Doutorado

1. FUJIMOTO, M.M.; Participação em banca de Luciara Indrusiak Weiss. Estudo dos Efeitos de Absorção no Espalhamento de Elétrons por Moléculas pelo Método de Frações Continuadas. 2011. Exame de qualificação (Doutorando em Física) - Universidade Federal de Santa Catarina.

2. FUJIMOTO, M.M.; SANCHEZ, S. D.; BETTEGA, M. H. F.. Participação em banca de Thiago Corrêa de Freitas. Espalhamento Elástico de Elétrons por Moléculas de Relevância Biológica. 2011. Exame de qualificação (Doutorando em Física) - Universidade Federal do Paraná.

3. Abatte, M.; Freire, J.A,O.; MOSCA, D. H.; **FUJIMOTO, M. M.** Participação em banca de Rodrigo José Ochekoski Mossanek. Estrutura Eletrônica e Transições de Fase Metal-Isolante em Óxidos de Vanádio. 2010. Exame de qualificação (Doutorando em Física) - Universidade Federal do Paraná.

4. Abatte, M.; MOSCA, D. H.; **FUJIMOTO, M. M.** Participação em banca de Rodrigo José Ochekoski Mussanek. Estrutura Eletrônica da Série Controlada por Preenchimento de Banda Ca1-Lax-VO3. 2008. Exame de qualificação (Doutorando em Física) - Universidade Federal do Paraná.

5. Kremer, G. M.; **FUJIMOTO, M. M.;** Marques Jr, W.. Participação em banca de Adriano W. da Silva. Fenômenos de Transporte em Sistemas Gasosos Binários Densos Reativos. 2007. Exame de qualificação (Doutorando em Física) - Universidade Federal do Paraná.

6. FUJIMOTO, M. M.; S NETO, Joaquin J. Participação em banca de Li Exequiel Espínola Lópes. Cálculo mecânico-quântico do processo colisional reativo Na_HF -> NaF+H. 1999. Exame de qualificação (Doutorando em Física) - Universidade de Brasília.

9.6.4 Qualificação de Mestrado

1. **FUJIMOTO, M.M.**; VIANA, R. L. .; MARQUES JR. W. Participação em banca de Albary Laibida Júnior. Teoria Cinética Veicular à la Enskog. 2009. Exame de qualificação (Mestrando em Física) - Universidade Federal do Paraná.

2. **FUJIMOTO, M.M.**; KREMER, G. M.; FREIRE, J.A,O.. Participação em banca de Marcelo dos Santos. Teoria Cinética de Gases Granulares de Esferas Rugosas. 2011. Exame de qualificação (Mestrando em Física) - Universidade Federal do Paraná.

9.5 Atividades de Pesquisa

9.5.1 Áreas de Pesquisa

A longo da carreira tenho me dedicado ao estudo de diferentes aspectos do estudo teórico do espalhamento de elétrons por moléculas, tais como, espalhamento elástico, excitação eletrônica, excitação ro-vibracional, efeito de troca de spin.

Com o Variacional Iterativo de Schwinger (MVIS) procurei estudar a interação de elétrons por moléculas de camada aberta, por duas razões: 1) por ser um tema pouco explorado devido ao fato da obtenção da função de onda e a geração de potencial terem que ser deduzidas para cada tipo específico de camada aberta; 2) Do ponto de vista experimental, as seções de choque eram difíceis de serem medidas, pois, em geral, moléculas de camada aberta com poucos átomos são espécies altamente instáveis e reativas, o que corrobora para a escassez de dados espectroscópicos na literatura. Entre os vários resultados obtidos, gostaríamos de destacar que mostramos pela primeira vez que a probabilidade da troca de spin ou inversão de spin de um feixe de elétrons polarizado, em alguns casos, não é tão pequena quanto se havia observado experimentalmente até então. As medidas mostravam que em átomos de camada aberta o efeito de troca de spin é razoavelmente grande, contudo a observação em moléculas de NO e O₂ mostravam que o efeito era muito pequeno. Com os nossos estudos mostramos que esses efeitos poderiam ser da ordem dos observados em átomos, se a posição de ressonância em canais de acoplamento de spin fossem levemente diferentes.

Ao trabalhar com o método das frações continuadas (MCF) implementei computacionalmente para moléculas lineares durante o meu doutorado e fizemos também mais recentemente a implementação de várias subrotinas no pacote MCF-3D, desenvolvido pelo Prof. Evandro Saidel Ribeiro durante o seu doutorado. Nessas implementações tivemos a colaboração com o prof. Lee Mu-Tao (UFSCar-SP) e prof. Sérgio E. Michelin (UFSC-SC) além de vários alunos de pós-graduação envolvidos nesse desenvolvimento.

Após o estágio de pós-doutorado na University College London, trouxe o pacote Computacional do Matriz-R aplicado a moléculas. Tenho realizado estudos de moléculas orgânicas com aplicações em sistemas biológicos, algumas moléculas componentes do DNA. A pesquisa está direcionada para a compreensão dos mecanismos de degradação de moléculas de DNA por elétrons de baixas energias, < 20 eV.

Atualmente também tenho realizado pesquisas sobre a fotoionização de moléculas, na qual desenvolvemos uma cooperação científica com um grupo experimental do Departamento de Física da Universidade Federal da Bahia (UFBA) e Teórico(DF)-experimental(DQ) da Universidade Federal de São Carlos (UFSCar).

9.5.2 Principais Colaborações Científicas atuais

- 1) Prof. Jonathan Tennyson – Department of Physics - University College London – UCL, Londres Reino Unido.
- 2) Prof. Luiz Eugênio Machado - Universidade Federal de São Carlos – DF-UFSCar, São Carlos – SP.
- 3) Prof. Manoel Gustavo Petrucelli Homem - Universidade Federal de São Carlos – DQ-UFSCar, São Carlos – SP.
- 4) Prof. Frederico Vasconcelos Prudente – Universidade Federal da Bahia – DF-UFBA, Salvador – BA.
- 5) Prof. Ricardo dos Reis Teixeira Marinho – Universidade Federal da Bahia – DF-UFBA, Salvador – BA.
- 6) Profa. Aline Medina dos Santos – Universidade Federal da Bahia – DF-UFBA, Salvador – BA.
- 7) Prof. Gabriel Luiz Cruz de Souza – Universidade Federal do Mato Grosso – DQ-UFMT, Cuiabá – MT.

9.5.3 Projetos de Pesquisas

1) 2001-2003 - Estudo teórico da excitação vibracional de moléculas de NO por impacto de elétrons (coordenador)

Neste projeto, Foram calculados a seção de choque de excitação vibracional para o espalhamento de elétrons por moléculas de NO e a seção de choque elástica de diversas moléculas de camada aberta. A faixa de energia do elétron incidente varia entre 1-500 eV. O método variacional iterativo de Schwinger (MVIS) será utilizado para a solução numérica das equações de espalhamento.

2) 2003-2011 - Estudo Teórico da Colisão de Elétrons por Moléculas (coordenador)

Este projeto destinou-se ao estudo teórico na dinâmica da interação elétron-molécula na faixa de energias baixa e intermediária. Pretendemos estudar vários aspectos existentes nesse tipo de colisão, entre eles, a colisão elástica de elétrons com moléculas de camada aberta, efeito de troca de spin, a excitação de elétrons de camada interna. Entre outros estudos estava a inclusão do potencial de absorção na dinâmica da interação permitindo o cálculo de seção de choque total. Os métodos utilizados foram o variacional iterativo de Schwinger (MVIS) e o método das Frações Continuadas (MCF).

Este projeto teve o apoio financeiro aprovado da Fundação Araucária, Edital 2006, protocolo 6163/2006 com vigência 2006-2010, Valor R\$ 13.000,00.

3) 2011- atual - Espalhamento de elétrons por biomoléculas (coordenador)

Um estudo publicado na revista Science mostrou que elétrons de baixa energia, produzidos por radiação ionizante, poderiam ser capturados por macromoléculas de DNA e induzir a dissociação dessas. Este estudo sugere que este mecanismo é a causa das alterações nas células vivas provocada por todos os tipos de radiação de alta energia, uma vez que as radiações prejudiciais de todos os tipos podem levar a ionização, a qual é seguida por uma cascata de elétrons secundários de baixa energia. A quebra e formação de novas ligações químicas podem gerar uma mutação devido às mudanças na estrutura do DNA. Essas mudanças causadas como resultado dessa interação com a radiação pode tanto ser prejudicial, por exemplo, quando atinge acidentalmente um organismo vivo, ou ser benéfica, por exemplo, quando usados para melhorar os protocolos de radioterapia para o tratamento de câncer. Uma compreensão completa do processo em nível molecular tem enormes vantagens potenciais. O mecanismo detalhado de dissociação ainda não está elucidado. Do ponto de vista de cálculos teóricos, não é possível modelar rigorosamente a colisão de elétrons com uma

macromolécula de DNA, mas podemos abordar o problema usando a ideia de que o elétron não interage com o DNA como um todo, mas interage em pontos específicos localizados. Sugere-se que algumas estruturas (subunidades) dos componentes do DNA capturam elétrons, gerando uma espécie aniônica, que então pode dissociar, causando perturbações à espinha dorsal do DNA, ou migrar, resultando possivelmente em várias quebras nas fitas. Os métodos para verificar o que acontece na molécula estão bastante avançados, embora a compreensão detalhada mecanismos ainda é muito reduzida. Para fazer progressos nesta área a nível molecular é importante determinar quais são estas subunidades, em quais ligações químicas ou região da molécula o elétron será capturado e também em que região preferencialmente ocorrerá a quebra das ligações químicas. Neste projeto vamos utilizar o método da Matriz-R.

4) Participação em projetos institucionais, tais como CT-INFRA e projeto Departamental multi-usuários para o laboratório de computação científica do Departamento de Física da UFPR.

9.5.4 Bolsas de Produtividade CNPq e Pós-Doutorado

- 1) Bolsista de Produtividade II do CNPq durante os períodos de 2007-2013.
- 2) Bolsista de Pós-Doutorado no Exterior pelo CNPq durante o período 2011-2012.

9.5.5 Emissão de Pareceres Ad Hoc

- 1) Durante o período como Bolsista de produtividade 2007-2013 emiti parecer ad hoc para projetos submetidos ao CNPq.
- 2) Parecer para a Revista Virtual de Química
- 3) Parecer para a Revista Journal of Molecular Modeling.

9.5.6 Citações em Artigos Científicos

De acordo com o Web of Science:

Total de trabalhos:27

Total de citações:130

Fator H:8

9.5.7 Prêmios

1) Figura do artigo J.Phys.B, 40, 4333, 2007 foi usada como capa da revista J.Phys.B. Edição especial de ressonância.