

Unidade: Centro de Ciências Exatas e da Natureza

Departamento: Química

Telefone de Contato: 83 3216 7933 (7433)

Área de Conhecimento: Química

Nº de Vagas: 1

Titulação/requisitos mínimos exigidos (vedada exigência de tese ou dissertação, bem como, de tempo de experiência): Doutorado em Química ou Doutorado em Física ou Doutorado em Engenharias ou Doutorado em Biologia ou Áreas afins.

Regime de Trabalho: dedicação exclusiva

Denominação e Classe: Assistente - A

Conteúdo Programático:

1. Simetria, grupos pontuais, grupos espaciais e Tabela Internacional de Cristalografia – Volume A;
2. Espalhamento de raios X por átomos isolados e por conjunto de átomos;
3. Difração de raios X e de elétrons por cristais e intensidades dos feixes difratados;
4. Métodos experimentais de difração de raios X e de elétrons por monocristais, policristais e filmes;
5. Método de Rietveld e suas aplicações na análise quantitativa de fases;
6. Aplicação de difração de raios X por monocristais na investigação estrutural de sistemas orgânicos, inorgânicos, sistemas aperiódicos e nanomateriais;
7. Métodos experimentais de espalhamento de raios X: *Small Angle Scattering* (SAX) e *Extended X-ray Absorption Fine Structure* (EXAFS). Aplicações;
8. Determinação de estruturas cristalinas I: método do átomo pesado, substituição molecular, *single-wavelength anomalous diffraction* (SAD);
9. Determinação de estruturas cristalinas II: métodos diretos probabilísticos, método de Patterson, *dual-space algorithms; charge flipping*;
10. Uso de *atomic pair distribution function* (PDF) na investigação de materiais moleculares.

Referências (se houver):

1. B.D. Cullity, S.R. Stock. Elements of X-Ray Diffraction. 3rd edition. Pearson. 2014. ISBN 10: 1-292-04054-8;
2. J. Als-Nielsen, D. McMorrow. Elements of Modern X-ray Physics, 2nd edition. John Willey & Sons. 2011. ISBN 978-0-470-97394-3;
3. P. Willmott. An Introduction to Synchrotron Radiation: Techniques and Applications. 2nd edition. John Willey & Sons. 2019. ISBN 978-1119280392;
4. C. Giacovazzo (Ed.). Fundamentals of Crystallography, 3rd edition. Oxford University Press, USA. 2011. ISBN 978-0199573660;
5. W. Clegg, A.J. Blake, J.M. Cole, J.S.O. Evans, P. Main, S. Parsons, D.J. Watkin (Ed.). Crystal Structure Analysis: Principles and Practice, 2nd edition. Oxford University Press, UK. 2009. ISBN 9780199219469;
6. R.A. Young (Ed.). The Rietveld Method, Oxford University Press, UK. 1995. ISBN 9780198559122;
7. W.I.F. David, K. Shankland, L.B. McCusker, C. Bärlocher (Ed.). Structure Determination from Powder Diffraction Data, Oxford University Press, UK. 2006. ISBN 9780199205530;
8. C. Hammond. The Basics of Crystallography and Diffraction, 4th edition. Oxford University Press, UK. 2015. ISBN 9780198738688;
9. J. P. Glusker, K. N Trueblood. Crystal Structure Analysis: A Primer, 2th edition, Oxford University Press, UK. 2010. ISBN 9780199576340;
10. J. Drenth. Principles Of Protein X-Ray Crystallography, 3th edition. Springer New York, NY. 2007. ISBN 9780387333342;
11. E. J. Mittermeijer (Editor), U. Welzel (Editor). Modern diffraction methods, 1st edition, Wiley-VCH, Weinheim, 2012. ISBN 9783527322794.