

IQU-747 Fundamentos da Química no Estado Sólido (60 horas)

Ementa:

Cristalografia Básica; Difração de Raios X; Cristaloquímica e descrição de estruturas tipo; Defeitos em sólidos; Sólidos não-estequiométricos; Estrutura eletrônica de sólidos; Propriedades elétricas e ópticas; Propriedades magnéticas; Métodos de síntese de sólidos. Objetiva entender os diversos tipos de interações envolvidas na formação dos sólidos. Entender o conceito de periodicidade no que se refere à construção de estruturas cristalinas. Descrever as propriedades geométricas e de simetria dos grupos e retículos cristalinos. Compreender o conceito de estruturas cristalinas análogas e utilizá-las na descrição de sólidos cristalinos mais complexos. Correlacionar aspectos estruturais de sólidos com as suas propriedades elétricas, ópticas, magnéticas, etc. Correlacionar os métodos de síntese com a estrutura e a propriedades obtidas.

1) Cristalografia Básica

Elementos de Simetria; Teoria dos grupos matemáticos; Grupos Pontuais; Conceito de cela unitária e rede cristalina; Classificação das celas unitárias; Sistemas cristalinos; Celas de Bravais; Grupos Pontuais; Cristal ideal e real; Notação de Hermann-Maugui; Redes periódicas; Planos reticulares e índices de Miller; Distâncias interplanares; Simetria translacional em cristais; Grupos Pontuais; Grupos Espaciais; Posições equivalentes e especiais; Tabelas Internacionais

2) Difração Raios X

Introdução à Difração de Raios X; Geração do raios X; Difração de raios X; Difração de pó e monocristal; Determinação de posições atômicas; Introdução ao Refinamento de estrutura; Aplicação e interpretação de dados de raios X de pó; Intensidade dos picos de difração; Tamanho do cristalito; Aspectos experimentais de DRX

3) Cristaloquímica e Estruturas tipo

Sólidos Iônicos, covalentes, metálicos e van der Waals; Relação entre raios e estabilidade estrutural; Energia de cela; Equação de Kapustenskii; Empacotamentos ccp, hcp e tp; Polimorfismo, isomorfismo e solução sólida; Sólidos do tipo MX e MX₂; Estruturas de óxidos mistos; Arranjos covalente estendidos; Silicatos ; Zeólitos.

4) Defeitos e Não-estequiometria

Defeitos e suas concentrações; Defeitos pontuais; Defeitos lineares; Defeitos planares; Defeitos tridimensionais; Condutividade iônica; Compostos não-estequiométricos

5) Estrutura Eletrônica de Sólidos

Ligação química em cristais; Teoria do elétron Livre; condutividade elétrica e mobilidade de elétrons; propriedades térmicas e elétricas em termos da teoria clássica; A mecânica Quântica aplicada do elétron livre; Ocupação dos estados eletrônicos; da teoria do elétron livre a teoria de bandas; número de estados em uma banda de energia; energia de bandas em semicondutores

6) Propriedades Elétricas

Semicondutores; semicondutores intrínsecos e extrínsecos; concentração de carregadores em semicondutores

7) Propriedades Ópticas

Interação da luz com átomos; Absorção e emissão de radiação em semicondutores; Propriedades ópticas; Fibras ópticas

7) Propriedades Magnéticas

Suceptibilidade Magnética; Paramagnetismo; Ferromagnetismo; Antiferromagnetismo; Ferrimagnetismo; Cristais piezoelétricos; Efeito Ferroelétrico; Supercondutividade

8) Métodos de preparação de sólidos

Método Cerâmico; Método sol-gel; Método do precursor; Método com microondas; Deposição química a vapor; Outros métodos.

Bibliografia

1. R. West, Solid State Chemistry and its Applications, John Wiley, N. Y., 480 pp., 1999.

2. L. Smart and E Moore, Solid State Chemistry: An Introduction, 3rd Edition , Taylor & Francis Group, London, 379 pp., 2005.
3. M. T. Weller, Inorganic Materials Chemistry, Oxford University Press; Oxford, 92 pp., 1994.
4. L. Azaroff; Introductions of Solids, 3rd Edition; Tata McGraw Hill, Publishing Company, Bombay, 437 pp., 1960.
5. H. M. Rosemberg; The Solid State, 3rd Edition; Oxford University Press; Oxford, 265 pp., 1988.
6. C. Hamond, The Basic of Crystallography and Diffraction, Oxford University Press; Oxford, 249 pp., 1999.