

IQU-837 Físico-Química do Estado Sólido (60 horas)

Ementa:

Tipos de sólidos. O modelo do gás de elétrons. Redes cristalinas e simetria. Rede recíproca. Determinação da estrutura cristalina por difração de raios-X. Bandas de energia. Dinâmica de redes cristalinas. Funções termodinâmicas. Defeitos de redes. Propriedades magnéticas. Superfícies. Espectroscopia. Síntese de materiais; 1. Tipos de sólidos: metais, isolantes e semicondutores. Classificação dos isolantes: covalentes, iônicos e moleculares; 2. Elétrons livres nos metais. Propriedades do gás de elétrons quântico. Condições de contorno periódicas. Espaço dos momentos. Grandezas de Fermi (vetor de onda, energia velocidade e temperatura); 3. Redes de Bravais e vetores primitivos. Célula unitária primitiva, de Wigner-Seitz e convencional. Exemplos de redes cristalinas (FCC, BCC, HCP etc). Redes recíprocas: definições e exemplos. Zonas de Brillouin. Planos das redes e índices de Miller. Difração de raios-X: formulações de Bragg e Von Laue; 4. Potencial periódico e teorema de Bloch. A aproximação de ligação forte (combinação linear de orbitais atômicos). Bandas de energia. Elétrons em um potencial fraco; 5. Dinâmica de redes. Modos normais de vibração. Modos ótico e acústico. Fônons. Matriz dinâmica. Funções termodinâmicas na aproximação harmônica. Modelos de Einstein e Debye para a capacidade calorífica. Difração de nêutrons; 6. Defeitos em cristais. Defeitos de Schottky e Frenkel. Centros de cor. Polarons e éxcitons; 7. Propriedades magnéticas, dia-, para-, e ferromagnetismo; 8. Superfícies. Reconstrução. Processos em superfícies: adsorção, reação e dessorção; 9. Síntese de materiais. Sólidos mássicos e materiais com dimensão reduzida.

Bibliografia:

1. Solid state physics, N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, 826 pp., 1976.
2. Solid State Chemistry and Its Applications, Anthony R. West, John Wiley & Sons, 1984.
3. The Physics and Chemistry of Materials, J. I. Gersten e F. W. Smith, John Wiley & Sons, 826 pp., 2001.
4. Introduction to solid state physics, C. Kittel, 6a Ed., 646 pp., 1986.
5. Chemical bonding in solids, J. K. Burdett, 336 pp., 1995.