



Universidade Federal  
de São João del-Rei

## COORDENADORIA DO CURSO DE FÍSICA

### PLANO DE ENSINO



<b>UNIDADE CURRICULAR:</b> Tópicos em Materiais	<b>PERÍODO:</b>	<b>CURRÍCULO:</b> 2019
---	-----------------	------------------------

<b>DOCENTE:</b> Ana Cláudia Monteiro Carvalho	<b>DEPARTAMENTO:</b> DCNAT
---	----------------------------

<b>PRÉ-REQUISITO:</b> Fundamentos de Mecânica Clássica e Química Geral	<b>CO-REQUISITO:</b> -
--	------------------------

#### CARGA HORÁRIA

<b>Carga Horária Total:</b> 72 ha - 66 h	<b>Carga Horária Prática:</b> -	<b>Carga Horária Teórica:</b> 72 ha - 66 h
--	---------------------------------	--

<b>GRAU:</b> Bacharelado/Licenciatura	<b>ANO:</b> 2021	<b>1º SEMESTRE REMOTO 2021</b>
---------------------------------------	------------------	--------------------------------

#### EMENTA

Revisão de Mecânica Quântica. Ligação química e teoria dos orbitais moleculares. Estrutura eletrônica de materiais: diferença entre materiais condutores, semi-condutores e isolantes. Modificação das propriedades eletrônicas de materiais devido a dopagem e inserção de defeitos. Apresentação de alguns materiais, suas propriedades e suas aplicações: ligas metálicas, vidros, cerâmicas, nanotubos, fulerenos, compósitos, células solares, etc. Simulação computacional em materiais.

#### OBJETIVOS

Apresentar os conceitos básicos sobre Ciência dos Materiais. Apresentar conhecimentos fundamentais para o entendimento das aplicações atuais e avançadas na área de nanomateriais e discutir o desenvolvimento da nanotecnologia. Inserir aos alunos os conceitos de simulação computacional de sistemas.

#### CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

##### 1. Revisão de Mecânica Quântica

- 1.1 A equação de Schrödinger independente do tempo
- 1.2 Mecânica Quântica para Partícula na Caixa

##### 2. Ligação Química e Teoria do Orbital Molecular

- 2.1 O átomo de hidrogênio
- 2.2 Método variacional e o Oscilador Harmônico
- 2.3 Aproximação de Born-Openheimer
- 2.4 Discutindo Hartree-Fock-Roothaan com o átomo de hélio
- 2.5 Aproximação LCAO-MO

##### 3. Propriedades Eletrônicas de Sólidos

- 3.1 Teoria do Orbital Molecular para sistemas periódicos
- 3.2 Potenciais periódicos e Teorema de Bloch
- 3.3 Definição de primeira Zona de Brillouin
- 3.4 Diferença entre materiais condutores, semicondutores e isolantes

##### 4. Cálculo de estrutura e propriedades de moléculas e sistemas periódicos

- 4.1 Introdução aos programas de cálculo de geometria e estrutura eletrônica
- 4.2 Cálculo de estrutura eletrônica de sistemas moleculares e periódicos

#### METODOLOGIA E RECURSOS AUXILIARES

Atividades síncronas e assíncronas onde serão discutidos os conceitos de física. Atividades individuais e em grupo (listas de exercício, atividades com simuladores e leituras complementares) serão realizadas de maneira remota. Todo curso será disponibilizado no Portal Didático. Haverá horário de atendimento remoto a ser combinado com os alunos.

#### AVALIAÇÃO

Serão atribuídas notas para Exercícios Extra-classe individuais (NExe), Trabalhos em Grupo (NTrab) e Seminários (NSem) - desenvolvidos ao longo do curso.

$$NExe_{Total} = \frac{\sum_{i=1}^n NExe_i}{n}$$

$$NTrab_{Total} = \frac{\sum_{i=1}^n NTrab_i}{n}$$

$$NSem_{Total} = \frac{\sum_{i=1}^n NSem_i}{n}$$

onde  $n$  é o número total de atividades e sendo NExe, NTrab e NSem avaliados em 10 pontos.

A nota final ( $N_{\text{Final}}$ ) será calculada a considerando a seguinte fórmula (estes serão os valores disponibilizados no Diário Graduação):

$$N_{\text{Final}} = 0,34 \times N_{\text{Exe}_{\text{Total}}} + 0,33 \times N_{\text{Trab}_{\text{Total}}} + 0,33 \times N_{\text{Sem}_{\text{Total}}}$$

Será considerado aprovado o aluno que obtiver  $N_{\text{final}} \geq 6$  e frequência  $\geq 75\%$ . ((Resolução nº 12, 04/04/2018 – CONEP/UFSJ). A frequência dos alunos será contabilizada por meio da realização das Atividades Avaliativas ou não desenvolvidas ao longo do Curso, previamente agendadas no Portal Didático. Se  $N_{\text{final}} < 6$ , o aluno terá direito a fazer uma atividade que substituirá a menor nota entre Nexe, Ntrab, NSem, caso o resultado da Atividade Substitutiva for superior à uma das Notas citadas (Resolução nº 12, 04/04/2018 – CONEP/UFSJ - Art. 19). Se a frequência for inferior a 75% o aluno não terá direito à prova substitutiva. O conteúdo da prova substitutiva compreende toda a matéria do semestre.

#### BIBLIOGRAFIA BÁSICA

ATKINS, P.; JONES, L. Princípios de Química – Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente. Porto Alegre: Bookman, 2001.

CALLISTER, W.D. Ciência e Engenharia de Materiais: Uma Introdução. 8a Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2012.

SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W.; OVERTON, T. L.; ROURKE, J. P. Química Inorgânica, 4a ed. São Paulo: Bookman, 2006.550 p.

#### BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

SHACKELFORD, J. F. Ciência dos Materiais, 6a ed. São Paulo: Pearson, 2008.

BARROS, H. L. C. Química Inorgânica: Uma Introdução. Belo Horizonte: UFMG, 1992.

LEE, J. D. Química inorgânica não tão concisa. São Paulo: Edgard Blucher, 2006.

BROWN, T. L.; LEMAY, H. E.; BURSTEN, B. E., BURDGE, J. R. Química, A Ciência Central, 9a ed. São Paulo: Pearson, 2005.

HOUSECROFT, C.; SHARPE, A. Química Inorgânica, vol. 1, 4a ed. Rio de Janeiro: LTC, 2013

\_\_\_\_\_  
Profa. Dra. Ana Claudia Monteiro Carvalho  
Docente Responsável

\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Alessandro Damásio Trani Gomes  
Coordenador do Curso

São João Del Rei-MG, 07 de março de 2021.

Aprovado pelo Colegiado em: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_.