



Universidade Federal
de São João del-Rei

COORDENADORIA DO CURSO DE FÍSICA
PLANO DE ENSINO



UNIDADE CURRICULAR: Química dos Materiais

PERÍODO: 3º

CURRÍCULO: 2019

DOCENTE: Luciana Guimarães

DEPARTAMENTO: DCNAT

PRÉ-REQUISITO: FA em Química Geral

CO-REQUISITO: -

CARGA HORÁRIA

Carga Horária Total: 72 ha - 66 h

Carga Horária Prática: -

Carga Horária Teórica: 72 ha - 66 h

GRAU: Bacharelado/Licenciatura

ANO: 2022

SEMESTRE: 1º

EMENTA

Revisão das teorias de ligação química e de orbitais moleculares, estrutura dos sólidos simples, tipos de sólidos: metálicos, iônicos e moleculares. Estrutura eletrônica de sólidos: isolantes, condutores e semicondutores. Fundamentos sobre difração de raios X (DRX). Condutores iônicos. Defeitos em sólidos. Apresentação de alguns materiais sólidos, suas propriedades importantes e suas aplicações: ligas metálicas, vidros, cerâmicas, zeólitas, nanotubos, fulerenos, compósitos, células solares, redes metalorgânicas (MOFs).

OBJETIVOS

Apresentar os conceitos básicos sobre a Química dos Materiais. Apresentar conhecimentos fundamentais para o entendimento das aplicações atuais e avançadas dos compostos inorgânicos, nanomateriais e a nanotecnologia.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

1.Revisão das Teorias de Ligação Química e orbitais moleculares:

- 1.1- Teoria de Lewis
- 1.2- Teoria de Ligação de valência;
- 1.3- Teoria orbital molecular (TOM) para moléculas diatômicas homo e heteronucleares.

2. Estrutura eletrônica de sólidos:

- 2.1-Estrutura de bandas de metais, isolantes e semicondutores a partir da TOM;
- 2.2- Semicondutores intrínsecos e extrínsecos;
- 2.3- Estrutura de junção p-n, LED (diodo) e transistor;

3.Estrutura cristalina de sólidos simples

- 3.1 -Célula unitária e sistemas cristalinos;
- 3.2- Os sete sistemas cristalinos e redes de Bravais;
- 3.3- Planos de rede e índices de Miller;
- 3.4- Empacotamento compacto: cúbico e hexagonal;
- 3.5- Cálculo de fator de empacotamento atômico e densidade;

4.Ligações químicas em Sólidos

- 4.1- Ligação Iônica
 - 4.1.1- Energia de rede: estimativas a partir de um modelo eletrostático
 - 4.1.2- Energia de rede: o ciclo de Born-Haber
- 4.2- Ligação Covalente;
- 4.3- Ligação Metálica;

5. Estrutura cristalina de sólidos cerâmicos

- 5.1- Empacotamento compacto de sólidos iônicos e determinação da densidade:
(sal gema, esfarelita, antiferita, diamante, wurtzita, cloreto de cério, rutilo, perovskita, espinélio);

6.Caracterização de sólidos por difração de raios-X:

- 6.1- Geração de raios-X;
- 6.2- Difração de raios-X e a Lei de Bragg;
- 6.3 -Cálculo do ângulo de difração para sistemas cristalinos utilizando regras de reflexão.

7.Defeitos Cristalinos, Sólidos não estequiométricos:

- 7.1-Cristais Perfeitos e imperfeitos;
- 7.2-Tipos de defeitos (Schottky, Frenkel);
- 7.3- Vacâncias e interstícios em cristais não estequiométricos;

- 8. Seminário sobre propriedades de: ligas metálicas, vidros, cerâmicas, zeólitas, nanotubos, fulerenos, compósitos, células solares, redes metalorgânicas (MOFs).

METODOLOGIA E RECURSOS AUXILIARES

Aulas expositivas em quadro negro e projetor multimídia; roteiros dirigidos utilizando artigos científicos e materiais de apoio, Lista de exercícios e Seminários.

AVALIAÇÃO

A avaliação será realizada por meio da aplicação de três avaliações teóricas (cada uma valendo 20 pontos) e apresentação de um seminário em grupo (valendo 10 pontos). A média final será obtida da seguinte expressão:

$$MF = \frac{P1 + P2 + P3 + Sem.}{7}$$

em que MF é a média final, P1 é a nota da primeira prova (valendo 20 pontos), P2 é nota da segunda prova (valendo 20 pontos), P3 é nota da terceira prova (valendo 20 pontos) e Sem. é a nota do seminário (valendo 10 pontos). O aluno que não obtiver nota maior ou igual a 6,0 poderá fazer a prova substitutiva (S) envolvendo o conteúdo relacionado com a prova de menor nota. A nota da prova (S) substituirá a menor nota entre P1, P2 e P3. Finalmente, se $MF \geq 6,0$ o aluno estará aprovado. Caso contrário, se $MF < 6,0$ o aluno estará reprovado.

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.

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

Docente Responsável

Coordenador do Curso

São João del Rei-MG

Aprovado pelo Colegiado em: ____/____/____.