



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA



TÓPICOS ESPECIAIS EM QUÍMICA Processos de obtenção e aplicação de óxidos semicondutores e introdução à espectroscopia Mössbauer		
Código:		Área de Concentração: Química
Carga Horária: 60	Créditos: 4	
Número de alunos: 12		
Responsável: Dra. Juliane Zacour Marinho e Professor José Domingos Fabris		
Objetivos: Apresentar e explorar os fundamentos principais a respeito da obtenção de óxidos semicondutores correlacionando com as propriedades eletrônicas e morfológicas, bem como algumas aplicações tecnológicas, com ênfase nas técnicas de difração de raios-X, reflectância difusa no UV-Vis e microscopia eletrônica de varredura, devido principalmente, a grande disponibilidade. Além disso, uma introdução à espectroscopia Mössbauer, com a apresentação da teoria e aplicações, está prevista.		
Programa		



1) Espectroscopia Mössbauer

- i) Absorção ressonante de radiação
- ii) Recuo nuclear nas transições óptica e nuclear
- iii) Interações hiperfinas (^{57}Fe)
- iv) Instrumentação em espectroscopia gama
- v) Tratamento de dados Mössbauer
- vi) Interpretação de espectros

2) Processos de obtenção e aplicação de óxidos semicondutores

a) Estrutura eletrônica dos sólidos

- i) Conceitos fundamentais
- ii) Teoria de bandas
- iii) Propriedades ópticas
- iv) Condutividade
- v) Semicondutores intrínsecos e extrínsecos

b) Química do estado sólido

- i) Princípios gerais
- ii) Defeitos estruturais
- iii) Compostos não estequiométricos
- iv) Soluções sólidas intersticiais e substitucionais
- v) Difusão de átomos e íons
- vi) Química dos semicondutores e pigmentos
- vii) Óxidos de metais 3d
- viii) Óxidos superiores
- ix) Heterojunções semicondutor – semicondutor
- x) Heterojunções metal – semicondutor

c) Métodos de preparação

- i) Método dos precursores poliméricos
- ii) Método de co-precipitação
- iii) Processo sol-gel
- iv) Síntese por deposição em vapor
- v) Síntese por rotas de refluxo
- vi) Método sonoquímico
- vii) Método solvotermal
- viii) Método hidrotérmico
- ix) Método hidrotérmico assistido por micro-ondas
- x) Síntese utilizando suportes e substratos

d) Propriedades eletrônicas e estruturais

- i) Conceitos fundamentais
- ii) Estudo avançado da estrutura e microestrutura cristalina
- iii) Refinamento Rietveld e interface do programa GSAS
- iv) Cálculos de Refinamento Rietveld
- v) Interpretação dos resultados e parâmetros obtidos
- vi) Espectros de reflectância difusa no UV-Vis
- vii) Controle dimensional e morfológico das partículas
- viii) Correlações importantes entre o processamento dos materiais e as propriedades

e) Aplicações tecnológicas

- i) Processos fotocatalíticos
- ii) Fundamentos e vantagens
- iii) Novos rumos na fotocatalise



3) Bibliografia:

a) Espectroscopia Mössbauer

- i. BOWEN, L.H.; De GRAVE, E. & VANDENBERGHE, R.E. Mössbauer Effect Studies of Magnetic Soils and Sediments. In: LONG, G.J. & GRANDJEAN, F. eds. Mössbauer Spectroscopy Applied to Magnetism and Materials Science. Vol 1. New York, Plenum, 1993.
- ii. FABRIS, J.D. & COEY, J.M.D. Espectroscopia Mössbauer do ^{57}Fe e Medidas Magnéticas na Análise de Geomateriais. In: ALVAREZ V., V.H.; SCHAEFER, C.E.G.R.; BARROS, N.F. de; MELLO, J.W.V. de & COSTA, L.M. da (eds). Tópicos em Ciências do Solo. Viçosa, Sociedade Brasileira de Ciência do Solo, 2:47-102, 2002.
- iii. FABRIS, J.D.; VIANA, J.H.M; SCHAEFER, C.E.G.R.; WYPYCH, F. ; STUCKI, J.W. Métodos Físicos de Análise em Mineralogia do Solo. In: Vander de Freitas Melo & Luis Reynaldo F Alleoni. (Org.). Química e Mineralogia do Solo. Viçosa: Sociedade Brasileira de Ciência do Solo, v. 1, pp 611-695, 2009.
- iv. LONG, G.J. Basic concepts of Mössbauer spectroscopy. In: LONG, G.J. Mössbauer Spectroscopy Applied to Inorganic Chemistry. Vol 1. New York, Plenum, 1984. p.7 - 26.
- v. MURAD, E. & CASHION, J. Mössbauer spectroscopy of environmental materials and their industrial utilization. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2004. 425p.
- vi. Artigos publicados na literatura relacionados aos assuntos abordados.

b) Processos de obtenção e aplicação de óxidos semicondutores

- i. Shriver, D. F., Atkins, P.W., Química Inorgânica, Porto Alegre, 4ª ed., Bookman, 2008.
- ii. Atkins, P., Paula, J., Físico-Química, vol. 2, 8ª ed., LTC Editora, 2008.
- iii. Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., Química Inorgânica, vol. 2, 4ª ed., LTC Editora, 2013.