

# PROGRAMA DE DISCIPLINA

<b>Código: QUI-B25</b>	<b>Nome: TEQI - Fotocatálise de Semicondutores</b>			
	<b>Teórica</b>	<b>Prática</b>	<b>Total</b>	<b>Unidade: INSTITUTO DE QUÍMICA</b>
<b>Carga Horária</b>	34		34	<b>Departamento: DQGI</b>
<b>Créditos</b>				<b>Curso(s): MESTRADO / DOUTORADO</b>
<b>Módulo</b>	10		10	<b>SEMESTRE:</b>

---

## **EMENTA**

Luz e as leis da fotoquímica; Semicondutores intrínsecos e extrínsecos; Teoria de bandas e estados eletrônicos em semicondutores; Interface semicondutor-líquido; Princípios da fotocatálise; fotossensibilizadores; reações fotocatalíticas.

---

## **METODOLOGIA**

Aulas expositivas abertas à discussão e seminários de alunos baseados em artigos atuais que trazem novidades sobre o tema.

---

## **CONTEÚDO PROGRAMÁTICO (TÓPICOS)**

### **1. Luz e as leis da fotoquímica**

- 1.1. Luz e energia
- 1.2. Propriedades ondulatórias e corpusculares da luz
- 1.3. Propriedades ondulatórias da matéria
- 1.4. Interações de luz e matéria
- 1.5. Leis da fotoquímica
- 1.6. Histórico da fotoquímica de semicondutores

### **2. Semicondutores intrínsecos**

- 2.1. Noções dos modelos de bandas
- 2.2. Modelo Físico: Aproximação do Elétron Quase Livre
- 2.3. Modelo Químico: Aproximação da Ligação Compacta
- 2.4. Estrutura eletrônica dos semicondutores
  - 2.4.1. Ocupação de estados
  - 2.4.2. Nível de Fermi
  - 2.4.3. Distribuição de Fermi-Dirac
  - 2.4.4. Densidade de Estados
  - 2.4.5. Energia de *Band Gap*
    - 2.4.5.1. Semicondutores de banda larga
    - 2.4.5.2. Semicondutores de banda estreita
- 2.5. Semicondutores Extrínsecos

2.5.1. Dopagem tipo p

2.5.2. Dopagem tipo n

### **3. Interface semicondutor-líquido**

3.1. Níveis de energia em semicondutores e líquidos

3.2. Potenciais de eletrodo x EPH e níveis de energia

3.3. Processo de transferência de carga

### **4. Fotocatálise de semicondutores**

4.1. Princípios

4.2. Processos primários de mecanismos fotoeletroquímico

4.3. Rendimento quântico

4.4. Eficiência quântica

### **5. Trapeadores de elétrons**

### **6. Dopantes mais comuns**

6.1. Metais

6.2. Ametais

### **7. Corantes orgânicos fotossensibilizadores**

### **8. Reações fotocatalíticas**

8.1. Mineralização de compostos orgânicos

8.2. Decomposição fotocatalítica da água (geração de hidrogênio)

8.2.1. Reagentes de sacrifício

8.3. Reforma foto-induzida de biomassa

---

## **BIBLIOGRAFIA**

CALVERT, J. G.; PITTS, J. N. Photochemistry, 2<sup>nd</sup> Ed., New York, JohnWiley & Sons, Inc., 1967.

HOFFMANN, M. R.; MARTIN, S. T.; CHOI, W.; BAHNEMANN, D. W. Environmental Applications of Semiconductor Photocatalysis, Chem. Rev. 1995, 95, 69-96.

NOZIK, A.J.; MEMMING, R. Physical Chemistry of Semiconductor-Liquid Interface, J. Phys. Chem. 1996, 100, 13061-13078.

BARD, A. J.; Photoelectrochemistry and Heterogeneous Photocatalysis at Semiconductors, Journal of Photochemistry, 1979, 10, 59-75.

HUHEEY, J. E.; KEITER, E. A.; KEITER, R. L. Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity, 4<sup>th</sup> Ed., New York, Harper Collins College Publishers, 1993.

ATKINS, P.; DE PAULA, J. Atkins Físico-Química, Vol. 2, 7<sup>a</sup> Ed., Rio de Janeiro, LTC, 2004.

KITTEL, C. Introdução à Física do Estado Sólido, 8<sup>a</sup> Ed. Rio de Janeiro, LCT, 2006.

MILLS, A., Le HUNTE, S. An overview of semiconductor photocatalysis, Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry 1997, 108, 1-35.

---

\_\_\_\_\_/\_\_\_\_\_/\_\_\_\_

\_\_\_\_\_  
Coordenador

---