

Síntesi i Estructura de Materials Cristal·lins i Amorfs**2012/2013**

Codi: 103279

Crèdits ECTS: 7

Titulació	Pla	Tipus	Curs	Semestre
2501922 Graduat en Nanociència i Nanotecnologia	983 Graduat en Nanociència i Nanotecnologia	OB	3	1

Professor de contacte

Nom: Juan Francisco Piniella Febrer

Correu electrònic: Juan.Piniella@uab.cat

Utilització d'idiomes

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Algun grup íntegre en anglès: No

Algun grup íntegre en català: Sí

Algun grup íntegre en espanyol: No

Prerequisits**Prerequisits**

És molt recomanable que per a cursar aquesta assignatura s'hagin superat les assignatures Química dels Elements, Química Orgànica i Laboratori de Microscòpies i Tècniques de Caracterització de Materials de segon curs del grau de Nanociència i Nanotecnologia, ja que molts conceptes de les assignatures de segon seran usats en l'assignatura Síntesi i Estructura de Materials Cristal·lins i Amorfs sense explicació prèvia.

Objectius**Objectius i contextualització**

Síntesi i Estructura de Materials Cristal·lins i Amorfs té com a objectiu el proporcionar un coneixement bàsic dels materials i nanomaterials des d'una òptica de la seva síntesi, estructura i propietats (principalment mecàniques i químiques). El seu contingut es basa en aspectes presentats anteriorment en assignatures de segon curs del grau. Dins la part corresponent a l'estructura dels materials es parteix de continguts propis de la Química dels Elements i del Laboratori de Microscòpies i Tècniques de Caracterització de Materials, mentre que la part dels materials polimèrics es basa en continguts propis de la Química Orgànica.

Es tracta d'una assignatura pròpia de Ciència dels Materials en la que se li dóna un èmfasi en la part estructural i sintètica, per això es troba dins la matèria Fonaments de Química per a Nanociència i Nanotecnologia. Síntesi i Estructura de Materials Cristal·lins i Amorfs té la continuació en l'assignatura Estat Sòlid on la Ciència dels Materials es concentra en les seves propietats físiques.

D'una forma unificada l'assignatura proporciona coneixements sobre l'estructura dels materials cristal·lins començant pels cristalls perfectes (teoria reticular i xarxes cristal·lines, simetria infinita i difracció de raigs X) i seguint pels cristalls reals (defectes cristal·lins). A continuació es completa l'estudi dels materials cristal·lins amb una presentació dels fonaments de les propietats mecàniques dels sòlids, de les transformacions defase en els metalls i de les estructures ceràmiques més importants. La síntesi de materials i nanomaterials ocupa dos capítols on s'exposen les diferents metodologies sintètiques. L'assignatura acaba amb l'estudi de les característiques més importants dels materials polimèrics.

L'assignatura consta de classes de teoria, classes de resolució d'exercicis, pràctiques d'aula i pràctiques de laboratori.

Competències

- Aplicar els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia a la resolució de problemes de natura quantitativa o qualitativa en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia.
- Aplicar les normes generals de seguretat i funcionament d'un laboratori i les normatives específiques per a la manipulació de la instrumentació i dels productes i materials químics i biològics tenint en compte les seves propietats i els riscos.
- Aprendre de manera autònoma.
- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia.
- Desenvolupar treballs de síntesi, caracterització i estudi de les propietats dels materials en la nanoescala a partir de procediments establerts prèviament.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques, identificar-ne el significat i relacionar-les amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades.
- Manipular els instruments i materials estàndards propis dels laboratoris d'assaigs físics, químics i biològics per a l'estudi i l'anàlisi de fenòmens en la nanoescala.
- Mantenir un compromís ètic.
- Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
- Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer els termes relatius als àmbits de la física, la química, la biologia, la nanociència i la nanotecnologia en llengua anglesa i fer servir l'anglès de manera eficaç per escrit i oralment en l'àmbit laboral.
- Reconèixer i analitzar problemes físics, químics i biològics en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia i plantejar respostes o treballs adequats per a la seva resolució, incloent-hi en els casos necessaris l'ús de fonts bibliogràfiques.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.

Resultats d'aprenentatge

1. Aprendre de manera autònoma.
2. Avaluar els resultats experimentals de manera crítica i deduir-ne el significat.
3. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
4. Descriure els mètodes de síntesi i les propietats dels polímers.
5. Diferenciar les propietats dels materials cristal·lins dels amorfs.
6. Dissenyar experiments senzills per a l'estudi de sistemes químicofísics simples.
7. Dur a terme procediments de síntesi, separació i purificació bàsics d'un laboratori químic
8. Dur a terme procediments de síntesi, separació i purificació bàsics en un laboratori de síntesi i caracterització.
9. Emprar la tecnologia de la informació i la comunicació per a la documentació de casos i problemes.
10. Enunciar i descriure les estructures cristal·lines dels materials i nanomaterials més importants.
11. Exposar informes breus sobre la matèria en anglès.
12. Fer càlculs correctes relatius a les propietats dels materials cristal·lins i amorfs, i dels nanomaterials.
13. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
14. Identificar els mètodes estadístics en el tractament dels resultats de les anàlisis per obtenir-ne informació de la qualitat.
15. Identificar els mètodes estàndard de síntesi de materials, i descriure els seus fonaments.
16. Identificar i situar l'equipament de seguretat del laboratori.
17. Interpretar les dades obtingudes a les mesures experimentals per a la caracterització d'un compost químic o un material.

18. Interpretar textos i bibliografia en anglès sobre química, a nivell bàsic.
19. Justificar els resultats obtinguts al laboratori per a processos de síntesi i caracterització de materials i nanomaterials d'acord amb els coneixements sobre la seva estructura i les seves propietats.
20. Justificar els resultats obtinguts al laboratori per a processos de síntesi, separació, purificació i caracterització de compostos químics en base als coneixements sobre la seva estructura i les seves propietats.
21. Manipular correctament el material de vidre i un altre tipus de materials habituals en un laboratori de síntesi i caracterització.
22. Manipular correctament el material i els instruments necessaris per a realitzar la preparació i caracterització de materials i nanomaterials.
23. Manipular reactius químics i materials amb seguretat.
24. Mantenir un compromís ètic.
25. Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
26. Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
27. Proposar idees i solucions creatives.
28. Raonar de forma crítica.
29. Realitzar càlculs amb els paràmetres estructurals de les cel·les de metalls i els sòlids iònics.
30. Reconèixer els termes relatius a la Química.
31. Reconèixer la relació entre estructura, característiques d'enllaç, i propietats dels sòlids.
32. Reconèixer les estructures dels materials cristal·lins a través dels paràmetres de cel·la.
33. Redactar informes sobre la matèria en anglès.
34. Relacionar les dades experimentals amb les propietats fisicoquímiques i/o anàlisi dels sistemes objecte d'estudi.
35. Relacionar les propietats dels sòlids amb les imperfeccions estructurals.
36. Representar gràficament les estructures dels metalls i dels composts iònics
37. Resoldre problemes i prendre decisions.
38. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
39. Utilitzar el material i la instrumentació de laboratori de manera adequada.
40. Utilitzar instruments bàsics de caracterització de composts químics i materials.
41. Utilitzar les estratègies adequades per a l'eliminació segura dels reactius.
42. Utilitzar programes de tractament de dades per elaborar informes.
43. Valorar la perillositat i els riscos a l'ús de mostres i reactius i aplicar les precaucions de seguretat oportunes per a cada cas (ulleres i/o guants especials, campana extractora, màscara de gasos, etc.)

Continguts

Síntesi i estructura de materials cristal·lins i amorfs (2012-13)

Codi 103279

Hores de docència: 30h teoria, 11h problemes, 5h pràctiques d'aula i 8h laboratori

Programa:

0. INTRODUCCIÓ A L'ASSIGNATURA (1h)

1. TEORIA RETICULAR I XARXES CRISTAL·LINES

El medi cristal·lí. Propietats bàsiques i definidores del medi cristal·lí. Abstracció del medi cristal·lí. Xarxa directa (o real). La xarxa cristal·lina com a base de R^3 . Fileres reticulars. Plans reticulars. Índexs de Miller. Espaiat reticular. Densitats reticulars. Matriu mètrica. Xarxa recíproca (espai dual). Relacions entre la xarxa recíproca i la xarxa directa. Càlculs reticulars. Transformació de sistemes de referència. Xarxes primitives i xarxes múltiples. Xarxes bidimensionals. Simetria puntual de les xarxes bidimensionals. Xarxes de Bravais. Simetria puntual de les xarxes de Bravais i relació amb els sistemes cristal·lins. (3h)

2.- SIMETRIA INFINITA

Simetria finita i infinita. Recordatori de simetria puntual. La simetria en un medi periòdic. Els 32 grups puntuals. Elements de simetria amb translació. Feixos d'elements de simetria. Els 17 Grups plans de simetria. Els 230 Grups espacials de simetria. La notació de Hermann-Mauguin. Ordre i multiplicitat. Posicions equivalents. Posicions generals i especials. Lletres de Wyckoff. Les taules internacionals de cristal·lografia. (6h)

3.- DIFRACCIÓ DE RAIGS X

Introducció. Condicions geomètriques de difracció. Equació de Laue, construcció d'Ewald, llei de Bragg. Intensitat de la difracció. Factor d'estructura. Extincions sistemàtiques. Llei de Friedel. Grups de Laue. Símbol de difracció. Determinació del grup espacial de simetria. Concepte de determinació d'estructura cristal·lina. Factor d'estructura i densitat electrònica. El factor d'estructura com a transformada de Fourier de la densitat electrònica. El problema de les fases. Utilitat de la determinació d'estructures cristal·lines. Bases de dades d'estructures cristal·lines. La difracció de pols. La cambra DebyeScherrer. El difractòmetre de pols. La difracció de pols com a tècnica d'identificació de fases cristal·lines . El Powder Diffraction File. (5h)

4. CRISTALL REAL

Ordre a curta i a llarga distància. Defectes puntuals: vacants, intersticials, substitucions. Defectes lineals: dislocacions. Defectes superficials: límits de gra. Observació de defectes cristal·lins.(2h)

PROBLEMES D'AULA (5 SESSIONS DE 2H)

(utilització dels programes Mercury i Carine, bases de dades)

- 1) Teoria reticular
- 2) Simetria (grups plans)
- 3) Simetria (grups espacials), tipus estructurals
- 4) Difracció de raigs X
- 5) Difracció de raigs X

5.- PROPIETATS MECÀNIQUES DELS SÒLIDS

Conceptes. Gràfiques tensió-deformació. Propietats mecàniques dels metalls. Deformació elàstica. Deformació plàstica. Dislocacions i mecanismes d'enduriment dels metalls. (4h)

6.- TRANSFORMACIONS DE FASE EN ELS METALLS

Fases, microestructures i microconstituents. Diagrames de fases de dos components. Sistemes eutèctics. Microestructures en diagrames amb eutèctics. Dissolucions sòlides i fases intermèdies. Eutectoides i peritèctics. Transformacions de fase i canvis microestructurals. Nucleació i creixement. Diagrames de transformació. Canvis en les propietats mecàniques. (4h)

7.- ESTRUCTURA I PROPIETATS DE LES CERÀMIQUES

Força electrostàtica d'enllaç. Model d'esferes compactes. Estructures eutàctiques. Estructures basades en empaquetaments d'ions. Estructures relacionades. Defectes en ceràmiques. Dissolucions sòlides. Diagrames de fases ceràmics. Propietats mecàniques. Tipus de materials ceràmics segons les seves aplicacions. Materials vitris. Vitroceràmiques. Altres materials. (7h)

8- SÍNTESI DE MATERIALS

Consideracions termodinàmiques i cinètiques de les reaccions dels sòlids. Reaccions sòlid-gas. Aspectes generals. Síntesi de capes primes. Physical Vapor Deposition. Chemical Vapor Deposition. Molecular Beam Epitaxy. Reaccions sòlid-líquid. Cristal·lització, precipitació i solidificació. Mètode Sol-Gel. Tècniques solvotèrmiques i hidrotèrmiques. Síntesi electroquímica. Reaccions sòlid-sòlid. Mètode ceràmic. Síntesi per combustió. Síntesi per microones. (7h)

9.- SÍNTESI DE NANOMATERIALS

Mètodes Top-down. Capes primes nanoestructurades. Mètodes Bottom-up. Síntesi de nanopartícules. Precipitació. Tècniques hidrotèrmiques. Síntesi assistida per micel·les. Mètodes tèrmics. Mètodes sol-gel. Mètode poliol. (4h)

10- SÍNTESI I ESTRUCTURA DE POLÍMERS

Conceptes bàsics. Pes molecular. Tipus de polímers. Mètodes de síntesi. Polímers d'addició. Polímers de condensació. Altres reaccions. Estructures i estereoisomeria. Cristal·linitat en polímers. Propietats mecàniques i termomecàniques. Aplicacions. Materials compostos. (4h)

LABORATORI DE SÍNTESI DE MATERIALS (2 SESSIONS DE 4H)

1) SÍNTESI I ESTUDI ESTRUCTURAL DE MATERIALS MAGNÈTICS

2) SÍNTESI DE NANOPARTÍCULES INORGÀNIQUES

Metodologia

Metodologia:

L'alumne realitzarà tres tipus d'activitats: dirigides, autònomes i supervisades.

1.- Activitats dirigides: L'assistència és obligada i es realitzen en presència d'un professor.

1. Classes teòriques: El professor exposa els continguts de l'assignatura i respon als possibles dubtes que tingui l'alumne.
2. Classes de problemes: Els coneixements adquirits en les classes magistrals i en les activitats autònomes de l'alumne, principalment a través de l'estudi, s'apliquen a la resolució de problemes i exercicis relatius als continguts de l'assignatura.
3. Pràctiques d'aula/Pràctiques de laboratori: Suposen la realització de treballs pràctics relatius als continguts de l'assignatura (treball amb programes per a PC i treballs de síntesi en el laboratori).

2.- Activitats autònomes: Amb aquestes activitats l'alumne tot sol, o en grup, ha d'assolir les competències pròpies de l'assignatura. Dins aquestes activitats hi trobem l'estudi, la resolució de problemes, la redacció de treballs, la lectura de textos i la recerca de bibliografia.

3.- Activitats supervisades: L'alumne pot sol·licitar al professorat de l'assignatura tutories de suport per a l'assimilació de la matèria exposada en les classes de teoria i de problemes, i per a la resolució de treballs de seguiment.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de problemes	11	0,44	1, 2, 3, 6, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 17, 18, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 34, 35, 36, 37, 38
Classes teòriques	40	1,6	2, 3, 4, 5, 6, 9, 10, 14, 15, 18, 24, 25, 28, 30, 31, 32, 35
Lectura de textos	2	0,08	1, 4, 5, 10, 14, 15, 18, 24, 28, 30, 31, 32, 35
Pràctiques d'aula i de laboratori	13	0,52	2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 26, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43
Tipus: Supervisades			
Tutories	5	0,2	2, 3, 4, 5, 6, 10, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 19, 20, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 34, 35, 36, 37
Tipus: Autònomes			
Estudi	60,75	2,43	1, 2, 4, 5, 6, 9, 10, 12, 13, 14, 15, 17, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36
Recerca de bibliografia	7	0,28	1, 4, 5, 10, 13, 14, 15, 18, 26, 28, 30, 31, 32, 34, 35
Redacció de treballs	10,25	0,41	1, 2, 4, 5, 9, 10, 13, 14, 15, 17, 18, 24, 25, 26, 27, 28, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 42
Resolució de problemes	16	0,64	1, 2, 9, 12, 17, 18, 20, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 34, 36, 37, 38, 42

Avaluació

Avaluació de l'assignatura:

L'assignatura serà avaluada de forma continuada i constarà de les activitats d'avaluació següents:

Part teòrica

Representa el 70% de la nota final. L'alumne pot optar per dos vies d'avaluació d'aquesta part: 1) L'avaluació continuada en la que es realitzaran 2 proves parcials, i

2) L'avaluació final on es realitzarà una única prova final.

Avaluació continuada:

Primer parcial: S'avaluaran els continguts dels Temes 0 a 5 (35% de la nota final)

Segon parcial: S'avaluaran els continguts dels Temes 6 a 10 (35% de la nota final)

Si se superen aquestes proves amb una nota mitjana superior a 5 (sempre que la nota d'un

Si la mitjana és inferior a 5 o alguna de les notes dels parcials és inferior a 4, l'alur

Prova final:

Els alumnes realitzaran una única prova final que comprendrà els continguts teòrics de to

A prova finalhi podran optar els alumnes que vulguin millorar la nota aconseguida en l'av

Resolució de problemes:

Representarà el 15% de la nota final. Els alumnes hauran de resoldre de forma autònoma p

Pràctiques d'aula i pràctiques de laboratori:

Representaran el 15% de la nota final. La nota serà la mitjana entre la valoració de la f

(50%)

L'assistència a les sessions pràctiques és obligatòria.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
-------	-----	-------	------	--------------------------

Proves escrites	70%	6	0,24	1, 2, 4, 5, 6, 10, 12, 14, 15, 17, 18, 24, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 34, 35, 36
Pràctiques de laboratori i d'aula	15%	1	0,04	1, 2, 3, 6, 7, 8, 9, 11, 13, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 30, 33, 34, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43
Resolució de problemes	20%	3	0,12	1, 2, 3, 6, 9, 11, 12, 13, 17, 18, 19, 20, 26, 27, 28, 29, 30, 33, 34, 36, 37, 38, 42

Bibliografia

Bibliografia:

Temes 1-5:

C. Giocovazzo, H. L. Monaco, G. Artioli, D. Viterbo, M. Milaneso, G. Ferraris, G. Gilli, P. Gilli, G. Zanotti and M. Catti. "Fundamentals of Crystallography" Edited by C. Giocovazzo. 3rd edition, IUCr Texts on Crystallography No. 15, IUCr/Oxford University Press, 2011. ISBN 978-0-19-957365-3.

C. Pico, M.L. López García, M.L. Veiga "Cristaloquímica de materiales" Editorial Síntesis, 2007. ISBN 978-84-975650-7-3

X. Solans "Introducció a la cristal·lografia", Edicions de la Universitat de Barcelona, 1999. ISBN 84-8338-124-9

Unió Internacional de Cristal·lografia <http://www.iucr.org/>

Departament de Cristal·lografia del Instituto de Química-Física Rocasolano del CSIC
<http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/index2.html>

Temes 6-10:

W.D. Callister, D.G. Rethwisch "Materials Science and Engineering", Wiley, 6th Ed. **ISBN-13:** 978-0470505861

D. R. Askeland, P.P Fulay, W.J. Wright "The Science and Engineering of Materials", C.L. Engineering, 6th Ed. **ISBN-13:** 978-0495296027

A.R. West "Solid State Chemistry and Applications", J. Wiley & Sons (1989) **ISBN-13:** 978-0471917977

J. N. Lalena, D. A. Cleary, E. E. Carpenter, N. F. Dean "Inorganic Materials. Synthesis and Fabrication", J. Wiley & Sons (2008) **ISBN-13:** 978-0471740049