

**Síntesis y Estructura de Materiales Cristalinos y Amorfos**

Código: 103279

Créditos ECTS: 7

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2501922 Nanociencia y Nanotecnología	OB	3	1

La metodología docente y la evaluación propuestas en la guía pueden experimentar alguna modificación en función de las restricciones a la presencialidad que impongan las autoridades sanitarias.

## Contacto

Nombre: Juan Francisco Piniella Febrer

Correo electrónico: Juan.Piniella@uab.cat

## Uso de idiomas

Lengua vehicular mayoritaria: catalán (cat)

Algún grupo íntegramente en inglés: No

Algún grupo íntegramente en catalán: No

Algún grupo íntegramente en español: No

## Equipo docente

Nuria Romero Fernández

Jordi García-Antón Aviñó

## Prerequisitos

### Prerrequisitos

Es muy recomendable que para cursar esta asignatura se hayan superado las asignaturas Química de los Elementos, Química Orgánica y Laboratorio de Microscopias y Técnicas de Caracterización de Materiales de segundo curso del grado de Nanociencia y Nanotecnología, ya que muchos conceptos de las asignaturas de segundo serán usados en la asignatura Síntesis y Estructura de Materiales Cristalinos y Amorfos sin explicación previa.

## Objetivos y contextualización

### Objetivos y contextualización

Síntesis y Estructura de Materiales Cristalinos y Amorfos tiene como objetivo el proporcionar un conocimiento básico de los materiales y nanomateriales desde un punto de vista de su síntesis, estructura y propiedades (principalmente mecánicas y químicas). Su contenido se basa en aspectos presentados anteriormente en asignaturas de segundo curso del grado. Dentro de la parte correspondiente a la estructura de los materiales se parte de contenidos propios de la Química de los Elementos y del Laboratorio de Microscopias y Técnicas de Caracterización de Materiales, mientras que la parte de los materiales poliméricos se basa en contenidos propios de la Química Orgánica. Se trata de una asignatura propia de Ciencia de los Materiales en la que se le da un énfasis en la parte estructural y sintética, por lo que se encuentra dentro de la materia Fundamentos de Química para Nanociencia y Nanotecnología. Síntesis y Estructura de Materiales Cristalinos y Amorfos tiene la continuación en la asignatura Estado Sólido donde la Ciencia de los Materiales se concentra en sus propiedades físicas. De una forma unificada la asignatura proporciona conocimientos sobre la estructura de los materiales cristalinos empezando por los cristales perfectos (teoría reticular y redes cristalinas, simetría

infinita y difracción de rayos X) y siguiendo por los cristales reales (defectos cristalinos). A continuación se completa el estudio de los materiales cristalinos con una presentación de los fundamentos de las propiedades mecánicas de los sólidos, de las transformaciones de fase en los metales y de las estructuras cerámicas más importantes. La síntesis de materiales y nanomateriales ocupa dos capítulos donde se exponen las diferentes metodologías sintéticas. La asignatura acaba con el estudio de las características más importantes de los materiales poliméricos. La asignatura consta de clases de teoría, clases de resolución de ejercicios, prácticas de aula y prácticas de laboratorio.

## Competencias

- Aplicar las normas generales de seguridad y funcionamiento de un laboratorio y las normativas específicas para la manipulación de la instrumentación y de los productos y materiales químicos y biológicos teniendo en cuenta sus propiedades y riesgos.
- Aplicar los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales relacionados con la Nanociencia y Nanotecnología a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa o cualitativa en el ámbito de la Nanociencia y Nanotecnología.
- Aprender de forma autónoma.
- Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
- Demostrar que comprende los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales relacionados con la Nanociencia y Nanotecnología.
- Desarrollar trabajos de síntesis, caracterización y estudio de las propiedades de materiales en la nanoescala en base a procedimientos previamente establecidos.
- Gestionar la organización y planificación de tareas.
- Interpretar los datos obtenidos mediante medidas experimentales, incluyendo el uso de herramientas informáticas, identificar su significado y relacionarlos con las teorías químicas, físicas o biológicas apropiada.
- Manipular los instrumentos y materiales estándares propios de laboratorios de ensayos físicos, químicos y biológicos para el estudio y análisis de fenómenos en la nanoescala.
- Mantener un compromiso ético.
- Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales.
- Obtener, gestionar, analizar, sintetizar y presentar información, incluyendo la utilización de medios telemáticos e informáticos.
- Proponer ideas y soluciones creativas.
- Razonar de forma crítica.
- Reconocer los términos relativos al ámbito de la Física, Química y Biología, así como a la Nanociencia y la Nanotecnología en lengua inglesa y utilizar eficazmente el inglés en forma escrita y oral en su ámbito laboral.
- Reconocer y analizar problemas físicos, químicos y biológicos en el ámbito de la Nanociencia y Nanotecnología, plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo en casos necesarios el uso de fuentes bibliográficas.
- Resolver problemas y tomar decisiones.
- Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo.

## Resultados de aprendizaje

1. Aprender de forma autónoma.
2. Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
3. Describir los métodos de síntesis y las propiedades de los polímeros.
4. Diferenciar las propiedades de los materiales cristalinos de los amorfos.
5. Diseñar experimentos sencillos para el estudio de sistemas químico-físicos simples.
6. Emplear la tecnología de la información y la comunicación para la documentación de casos y problemas.
7. Enunciar y describir las estructuras cristalinas de los materiales y nanomateriales más importantes.
8. Evaluar resultados experimentales de forma crítica y deducir su significado.
9. Exponer breves informes sobre la materia en inglés.
10. Gestionar la organización y planificación de tareas.

11. Identificar los métodos estadísticos en el tratamiento de los resultados de los análisis para obtener información de su calidad.
12. Identificar los métodos estándar de síntesis de materiales y nanomateriales y describir sus fundamentos.
13. Identificar y ubicar el equipamiento de seguridad del laboratorio.
14. Interpretar los datos obtenidos en las medidas experimentales para la caracterización de un compuesto químico o un material.
15. Interpretar textos y bibliografía en inglés sobre Química, a nivel básico.
16. Justificar los resultados obtenidos en el laboratorio para procesos de síntesis y caracterización de materiales y nanomateriales en base a los conocimientos sobre su estructura y propiedades.
17. Justificar los resultados obtenidos en el laboratorio para procesos de síntesis, separación, purificación y caracterización de compuestos químicos en base a los conocimientos sobre su estructura y propiedades.
18. Llevar a cabo procedimientos de síntesis, separación y purificación básicos de un laboratorio químico
19. Llevar a cabo procedimientos de síntesis, separación y purificación básicos en un laboratorio de síntesis y caracterización.
20. Manipular correctamente el material de vidrio y otro tipo de materiales habituales en un laboratorio de síntesis y caracterización.
21. Manipular correctamente el material y los instrumentos necesarios para realizar la preparación y caracterización de materiales y nanomateriales.
22. Manipular reactivos químicos y materiales con seguridad.
23. Mantener un compromiso ético.
24. Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales.
25. Obtener, gestionar, analizar, sintetizar y presentar información, incluyendo el uso de medios telemáticos e informáticos.
26. Proponer ideas y soluciones creativas.
27. Razonar de forma crítica.
28. Realizar correctamente cálculos relativos a las propiedades de los materiales cristalinos y amorfos, y de los nanomateriales.
29. Realizar cálculos con los parámetros estructurales de las celdas de metales y sólidos iónicos.
30. Reconocer la relación entre estructura, características de enlace, y propiedades de los sólidos.
31. Reconocer las estructuras de los materiales cristalinos a través de los parámetros de celda.
32. Reconocer los términos relativos a la Química.
33. Redactar informes sobre la materia en inglés.
34. Relacionar las propiedades de los sólidos con las imperfecciones estructurales.
35. Relacionar los datos experimentales con las propiedades físico-químicas y/o análisis de los sistemas objeto de estudio.
36. Representar gráficamente las estructuras de los metales y de los compuestos iónicos.
37. Resolver problemas y tomar decisiones.
38. Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo.
39. Utilizar el material y instrumentación de laboratorio de manera adecuada.
40. Utilizar instrumentos básicos de caracterización de compuestos químicos y materiales
41. Utilizar las estrategias adecuadas para la eliminación segura de los reactivos.
42. Utilizar programas de tratamiento de datos para elaborar informes.
43. Valorar la peligrosidad y los riesgos del uso de muestras y reactivos y aplicar las precauciones de seguridad oportunas para cada caso (gafas y/o guantes especiales, campana extractora, máscara de gases, etc.).

## Contenido

Contenidos

Síntesis y estructura de materiales cristalinos y amorfos (2019-20)

Código 103279

Horas de docencia: 30h teoría, 11h problemas, 5h prácticas de aula y 8h laboratorio

Programa:

## 0. INTRODUCCIÓN A LA ASIGNATURA (1h)

## 1. TEORÍA RETICULAR Y REDES CRISTALINAS

El medio cristalino. Propiedades básicas y definidoras del medio cristalino. Abstracción del medio cristalino. Red directa (o real). La red cristalina como base de  $R^3$ . Hileras reticulares. Planes reticulares. Índices de Miller. Espaciado reticular. Densidades reticulares. Matriz métrica. Red recíproca (espacio dual). Relaciones entre la red recíproca y la red directa. Cálculos reticulares. Transformación de sistemas de referencia. Redes primitivas y redes múltiples. Redes bidimensionales. Simetría puntual de las redes bidimensionales. Redes de Bravais. Simetría puntual de las redes de Bravais y relación con los sistemas cristalinos. (3h)

## 2.- SIMETRÍA INFINITA

Simetría finita e infinita. Recordatorio de simetría puntual. La simetría en un medio periódico. Los 32 grupos. Simetría finita e infinita. Recordatorio de simetría puntual. La simetría en un medio periódico. Los 32 grupos puntuales. Elementos de simetría con traslación. Haces de elementos de simetría. Los 17 Grupos planos de simetría. Los 230 Grupos espaciales de simetría. La notación de Hermann-Mauguin. Orden y multiplicidad. Posiciones equivalentes. Posiciones generales y especiales. Letras de Wyckoff. Las tablas internacionales de cristalografía. (6h)

## 3.- DIFRACCIÓN DE RAYOS X

Introducción. Condiciones geométricas de difracción. Ecuación de Laue, construcción de Ewald, ley de Bragg. Intensidad de la difracción. Factor de estructura. Extinciones sistemáticas. Ley de Friedel. Grupos de Laue. Símbolo de difracción. Determinación del grupo espacial de simetría. Concepto de determinación de estructura cristalina. Factor de estructura y densidad electrónica. El factor de estructura como transformada de Fourier de la densidad electrónica. El problema de las fases. Utilidad de la determinación de estructuras cristalinas. Bases de datos de estructuras cristalinas. La difracción de polvo. El cuarto Debye Scherrer. El difractómetro de polvo. La difracción de polvo como técnica de identificación de fases cristalinas. El Powder Diffraction File. (5h)

## 4. CRISTAL REAL

Orden a corta y larga distancia. Defectos puntuales: vacantes, intersticiales, sustituciones. Defectos lineales: dislocaciones. Defectos superficiales: límites de grano. Observación de defectos cristalinos. (2h)

## PROBLEMAS DE AULA (5 SESIONES DE 2H)

(Utilización de los programas Mercury y Carine, bases de datos)

1) Teoría reticular

2) Simetría (grupos planos)

3) Simetría (grupos espaciales), tipos estructurales

4) Difracción de rayos X (1)

5) Difracción de rayos X (2)

## 5.- PROPIEDADES MECÁNICAS DE LOS SÓLIDOS

Conceptos. Gráficas tensión-deformación. Propiedades mecánicas de los metales. Deformación elástica. Deformación plástica. Dislocaciones y mecanismos de endurecimiento de los metales. (4h)

## 6.- TRANSFORMACIONES DE FASE EN LOS METALES

Fases, microestructuras y microconstituyentes. Diagramas de fases de dos componentes. Sistemas eutéticos. Microestructuras en diagramas con eutéticos. Disoluciones sólidas y fases intermedias. Eutectoides y

peritéctica. Transformaciones de fase y cambios microestructurales. Nucleación y crecimiento. Diagramas de transformación. Cambios en las propiedades mecánicas. (4h)

## 7.- ESTRUCTURA Y PROPIEDADES DE LAS CERÁMICAS

Fuerza electrostática de enlace. Modelo de esferas compactas. Estructuras eutécticas. Estructuras basadas en empaquetamientos de iones. Estructuras relacionadas. Defectos en cerámicas. Disoluciones sólidas. Diagramas de fases cerámicos. Propiedades mecánicas. Tipos de materiales cerámicos según sus aplicaciones. Materiales vítreos. Vitrocerámicas. Otros materiales. (7h)

## 8-. SÍNTESIS DE MATERIALES

Consideraciones termodinámicas y cinéticas de las reacciones de los sólidos. Reacciones sólido-gas. Aspectos generales. Síntesis de capas delgadas. Physical Vapor Deposition. Chemical Vapor Deposition. Molecular Beam Epitaxy. Reacciones sólido-líquido. Cristalización, precipitación y solidificación. Método Sol-Gel. Técnicas solvotérmicas e hidrotérmicas. Síntesis electroquímica. Reacciones sólido-sólido. Método cerámico. Síntesis por combustión. Síntesis por microondas. (7h)

## 9.- SÍNTESIS DE NANOMATERIALES

Métodos Top-down. Capas delgadas nanoestructuradas. Métodos Bottom-up. Síntesis de nanopartículas. Precipitación. Técnicas hidrotérmicas. Síntesis asistida por micelas. Métodos térmicos. Métodos sol-gel. Método poliol. (4h)

## 10-. SÍNTESIS Y ESTRUCTURA DE POLÍMEROS

Conceptos básicos. Peso molecular. Tipos de polímeros. Métodos de síntesis. Polímeros de adición. Polímeros de condensación. Otras reacciones. Estructuras y estereoisomería. Cristalinidad en polímeros. Propiedades mecánicas y termomecánicas. Aplicaciones. Materiales compuestos. (4h)

## LABORATORIO DE SÍNTESIS DE MATERIALES (2 SESIONES DE 4H)

### 1) SÍNTESIS Y ESTUDIO ESTRUCTURAL DE MATERIALES MAGNÉTICOS

### 2) SÍNTESIS DE NANOPARTÍCULAS INORGÁNICAS

## **Metodología**

Metodología:

El alumno realizará tres tipos de actividades: dirigidas, autónomas y supervisadas.

1.- Actividades dirigidas: La asistencia es obligatoria y se realizan en presencia de un profesor.

1. Clases teóricas: El profesor expone los contenidos de la asignatura y responde a las posibles dudas que tenga el alumno.

2. Clases de problemas: Los conocimientos adquiridos en las clases magistrales y en las actividades autónomas del alumno, principalmente a través del estudio, se aplican a la resolución de problemas y ejercicios relativos a los contenidos de la asignatura.

3. Prácticas de aula / Prácticas de laboratorio: Suponen la realización de trabajos prácticos relativos a los contenidos de la asignatura (trabajo con programas para PC y trabajos de síntesis en el laboratorio).

2.- Actividades autónomas: Con estas actividades el alumno solo, o en grupo, debe alcanzar las competencias propias de la asignatura. Dentro de estas actividades encontramos el estudio, la resolución de problemas, la redacción de trabajos, la lectura de textos y la búsqueda de bibliografía.

3.- Actividades supervisadas: El alumno puede solicitar al profesorado de la asignatura tutorías de apoyo para la asimilación de la materia expuesta en las clases de teoría y de problemas, y para la resolución de trabajos de seguimiento.

## Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
<b>Tipo: Dirigidas</b>			
Clases teóricas	40	1,6	8, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 11, 12, 15, 23, 24, 27, 32, 30, 31, 34
Lectura de textos	2	0,08	1, 3, 4, 7, 11, 12, 15, 23, 27, 32, 30, 31, 34
Problemas de clase	11	0,44	1, 8, 2, 5, 6, 7, 9, 28, 10, 11, 14, 15, 23, 24, 25, 26, 27, 29, 32, 30, 31, 35, 34, 36, 37, 38
Prácticas de laboratorio y de aula	13	0,52	8, 2, 3, 4, 5, 18, 19, 6, 7, 9, 28, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 20, 21, 22, 23, 25, 27, 29, 32, 30, 31, 33, 35, 34, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43
<b>Tipo: Supervisadas</b>			
Tutorías	5	0,2	8, 2, 3, 4, 5, 7, 28, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 17, 23, 24, 25, 26, 27, 29, 32, 30, 31, 35, 34, 36, 37
<b>Tipo: Autónomas</b>			
Búsqueda bibliográfica	7	0,28	1, 3, 4, 7, 10, 11, 12, 15, 25, 27, 32, 30, 31, 35, 34
Estudio	60,75	2,43	1, 8, 3, 4, 5, 6, 7, 28, 10, 11, 12, 14, 24, 25, 26, 27, 29, 32, 30, 31, 33, 35, 34, 36
Redacción de trabajos	10,25	0,41	1, 8, 3, 4, 6, 7, 10, 11, 12, 14, 15, 23, 24, 25, 26, 27, 32, 30, 31, 33, 35, 34, 36, 37, 38, 42
Resolución de problemas	16	0,64	1, 8, 6, 28, 14, 15, 17, 23, 24, 25, 26, 27, 29, 32, 35, 36, 37, 38, 42

## Evaluación

Evaluación de la asignatura:

La asignatura será evaluada de forma continuada y constará de las actividades de evaluación siguientes:

Parte teórica

Representa el 70% de la nota final. El alumno puede optar por dos vías de evaluación de esta parte:

- 1) La evaluación continua en la que se realizarán 2 pruebas parciales, y
- 2) La evaluación final donde se realizará una prueba final.

Evaluación continua:

Primer parcial: Se evaluarán los contenidos de los Temas 0 a 5 (35% de la nota final)

Segundo parcial: Se evaluarán los contenidos de los Temas 6 a 10 (35% de la nota final)

Si se superan estas pruebas con una nota media superior a 5.0 (siempre que la nota de uno de los parciales no sea inferior a 4) no será necesario hacer la prueba final de evaluación.

Si la media es inferior a 5, o alguna de las notas de los parciales es inferior a 4, el alumno deberá presentarse a la prueba final de recuperación para aprobar la asignatura.

Prueba final:

Los alumnos realizarán una prueba final que se dividirá en dos exámenes correspondientes a cada bloque de la asignatura. Cada examen tendrá un peso del 35% de la nota global. Los alumnos podrán presentarse a uno o los dos bloques del examen final. Para aprobar la asignatura, el promedio de exámenes de los dos bloques (parciales o examen final) debe ser igual o superior a 5.0 (la nota de cada bloque debe ser superior a 4).

Seminarios (entregas):

Representará el 15% de la nota final.

Primer Parcial: Los alumnos deberán resolver de forma autónoma problemas relacionados con los contenidos de la asignatura que se entregarán en clase.

Segundo Parcial: La asistencia a clase es obligatoria. Por lo tanto, cuando el profesor lo considere oportuno, y sin aviso previo, podrá recoger evidencias del trabajo continuo: problemas resueltos en clase o en casa, pruebas escritas en clase... En caso de no asistir justificadamente a alguna de las evidencias, esta evidencia no se considerará en el cálculo de la nota de evidencias. La justificación requerirá la presentación de justificante médico (no es válido el solapamiento con otras asignaturas, viajes, trabajo...).

Prácticas de aula y prácticas de laboratorio:

Representarán el 15% de la nota final. La nota será la media entre la valoración del trabajo realizado por el alumno en las prácticas de aula (50%) y en las prácticas de laboratorio (50%).

La asistencia a las sesiones prácticas es obligatoria.

Mejorar nota en el examen final

Se podrán presentar al examen final aquellos alumnos que hayan aprobado la asignatura por curso pero que quieran mejorar nota de uno o de los dos exámenes parciales bajo las siguientes condiciones:

- 1) si el alumno mejora la nota, se utilizará la mejor nota.
- 2) si el alumno no mejora la nota, se hará la media de las dos notas.

Otros

Cualquier acción de copia en las actividades de evaluación supondrá un cero a la asignatura, con independencia de otras implicaciones disciplinarias.

## Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Problem resolutions	15%	3	0,12	1, 8, 2, 5, 6, 9, 28, 10, 14, 15, 16, 17, 25, 26, 27, 29, 32, 33, 35, 36, 37, 38, 42
exámenes escritos	70%	6	0,24	1, 8, 3, 4, 5, 7, 28, 11, 12, 14, 15, 23, 26, 27, 29, 32, 30, 31, 35, 34, 36

prácticas de laboratorio y de aula	15%	1	0,04	1, 8, 2, 5, 18, 19, 6, 9, 10, 13, 14, 15, 16, 17, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 32, 33, 35, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43
------------------------------------	-----	---	------	--

---

## Bibliografía

Bibliografía:

Temas 1-5:

C. Giacovazzo, 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. Giacovazzo. 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 Institut de Química-Física Rocasolano del CSIC

<http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/index2.html>

Temas 6-10:

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

W.D. Callister, Jr., D. G. Rethwisch "Fundamentals of Materials Science and Engineering", Wiley, 4th Ed. ISBN 978-1-118-32269-7

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

A. Rudin, P. Choi "The Elements of Polymer Science and Engineering" Academic Press, 3rd. Ed. ISBN 978-0-12-382178-2