

**Síntesi i Estructura de Materials Cristal·lins i Amorfs**

Codi: 103279

Crèdits: 7

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2501922 Nanociència i Nanotecnologia	OB	3	1

La metodologia docent i l'avaluació proposades a la guia poden experimentar alguna modificació en funció de les restriccions a la presencialitat que imposin les autoritats sanitàries.

### Professor/a de contacte

Nom: Juan Francisco Piniella Febrer

Correu electrònic: Juan.Piniella@uab.cat

### Utilització d'idiomes a l'assignatura

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Grup íntegre en anglès: No

Grup íntegre en català: No

Grup íntegre en espanyol: No

### Altres indicacions sobre les llengües

També s'usarà la llengua castellana

### Equip docent

Fernando Novio Novio Vazquez

### 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·lins. Bases de dades d'estructures cristal·lins. La difracció de pols. La cambra Debye-Scherrer. El difractòmetre de pols. La difracció de pols com a tècnica d'identificació de fases cristal·lins. 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.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

## 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 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 5.0 (sempre que la nota d'un dels parcials no sigui inferior a 4) no caldrà fer la prova final d'avaluació.

Si la mitjana és inferior a 5, o alguna de les notes dels parcials és inferior a 4, l'alumne s'haurà de presentar a la prova final de recuperació per a aprovar l'assignatura.

#### *Prova final:*

Els alumnes realitzaran una prova final que es dividirà en dos exàmens corresponents a cada bloc de l'assignatura. Cada examen tindrà un pes del 35% de la nota global. Els alumnes podran presentar-se a un o als dos blocs de l'examen final. Per aprovar l'assignatura, la mitjana d'exàmens dels dos blocs (parcials o examen final) ha de ser igual o superior a 5.0 (la nota de cada bloc ha de ser superior a 4).

#### *Evidències:*

Representarà el 15% de la nota final.

Primer Parcial: Els alumnes hauran de resoldre de forma autònoma problemes relacionats amb els continguts de l'assignatura que es lliuraran a classe.

Segon Parcial: L'assistència a classe és obligatòria. Per tant, quan el professor ho consideri oportú, i sense avis previ, podrà recollir evidències del treball continu: problemes resolts a classe o a casa, proves escrites a classe... En cas de no assistir justificadament a alguna de les evidències, aquesta evidència no es considerarà en el càlcul de la nota d'evidències. La justificació requerirà la presentació de justificant mèdic (no és vàlid el solapament amb altres assignatures, viatges, treball ...).

#### *Pràctiques d'aula i pràctiques de laboratori:*

Representaran el 15% de la nota final. La nota serà la mitjana entre la valoració de la feina realitzada per l'alumne en les pràctiques d'aula (50%) i en les pràctiques de laboratori (50%).

L'assistència a les sessions pràctiques és obligatòria.

#### *Millorar nota a l'examen final*

Es podran presentar a l'examen final aquells alumnes que hagin aprovat l'assignatura per curs però que vulguin millorar nota d'un o dels dos exàmens parcials sota les següents condicions:

- 1) si l'alumne millora la nota, s'utilitzarà la millor nota.
- 2) si l'alumne no millora la nota, es farà la mitjana de les dues notes.

#### *Altres*

Qualsevol acció de còpia a les activitats d'avaluació suposarà un zero a l'assignatura, amb independència d'altres implicacions disciplinàries.

## 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
Prácticas de laboratorio 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	15%	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. Giacobazzo, 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. Giacobazzo. 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.

U. Müller "Relaciones de simetría entre estructuras cristalinas", Ediciones Síntesis, ISBN 978-84-9955897-6-3.

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

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

## **Programari**

- 1) Programes de Microsoft (principalment Word, Excel i Power Point)
- 2) MAXIMA