



Guia docent

295914 - FMF - Fonaments dels Materials Funcionals

Última modificació: 27/05/2024

Unitat responsable: Escola d'Enginyeria de Barcelona Est
Unitat que imparteix: 748 - FIS - Departament de Física.

Titulació: GRAU EN ENGINYERIA MECÀNICA (Pla 2009). (Assignatura optativa).
GRAU EN ENGINYERIA QUÍMICA (Pla 2009). (Assignatura optativa).
GRAU EN ENGINYERIA DE MATERIALS (Pla 2010). (Assignatura optativa).

Curs: 2024 **Crèdits ECTS:** 6.0 **Idiomes:** Anglès

PROFESSORAT

Professorat responsable: Lloveras Muntane, Pol Marcel
Cazorla Silva, Claudio

Altres: Segon quadrimestre:
CLAUDIO CAZORLA SILVA - M10
POL MARCEL LLOVERAS MUNTANE - M10
ROBERTO MACOVEZ - M10

CAPACITATS PRÈVIES

Es recomana haver cursat les assignatures de Metal·lúrgica Física, Propietats Elèctriques i Magnètiques dels Materials, Propietats Mecàniques dels Materials i Propietats Òptiques, Tèrmiques i Acústiques dels Materials.

COMPETÈNCIES DE LA TITULACIÓ A LES QUALS CONTRIBUEIX L'ASSIGNATURA

Transversals:

02 SCS N3. SOSTENIBILITAT I COMPROMÍS SOCIAL - Nivell 3: Tenir en compte les dimensions social, econòmica i ambiental en aplicar solucions i dur a terme projectes coherents amb el desenvolupament humà i la sostenibilitat.
06 URI N3. ÚS SOLVENT DELS RECURSOS D'INFORMACIÓ - Nivell 3: Planificar i utilitzar la informació necessària per a un treball acadèmic (per exemple, per al treball de fi de grau) a partir d'una reflexió crítica sobre els recursos d'informació utilitzats.
07 AAT N2. APRENTATGE AUTÒNOM - Nivell 2: Dur a terme les tasques encomanades a partir de les orientacions bàsiques donades pel professorat, decidint el temps que cal emprar per a cada tasca, incloent-hi aportacions personals i ampliant les fonts d'informació indicades.

METODOLOGIES DOCENTS

Teoria i estudi de casos: El professor presenta els conceptes fonamentals i algunes demostracions, complementant amb exemples claus i la discussió d'algunes aplicacions.

OBJECTIUS D'APRENTATGE DE L'ASSIGNATURA

En acabar el curs, l'alumne ha de ser capaç de:

- Conèixer els fonaments de propietats funcionals de materials, en particular relacionades amb l'energia, la química i la biomedicina, i el seu comportament sota l'acció de camps externs.
- Disposar de la capacitat per abordar problemes conceptuals dels reptes de les tecnologies actuals i futures en els dominis de l'enginyeria de materials.



HORES TOTALES DE DEDICACIÓ DE L'ESTUDIANTAT

Tipus	Hores	Percentatge
Hores grup mitjà	60,0	40.00
Hores aprenentatge autònom	90,0	60.00

Dedicació total: 150 h

CONTINGUTS

Bloc 1. Fonaments físics de les propietats tèrmiques dels materials

Descripció:

Tema 1.1 Introducció a la física estadística

Macroestats i microestats. Entropia i probabilitat termodinàmica. Funcions de distribució: Fermi-Dirac, Bose-Einstein i Maxwell-Boltzmann. Funció de partició i propietats termodinàmiques.

Tema 1.2 Propietats tèrmiques del gas ideal

Gas ideal monoatòmic. Interpretació estadística del treball i la calor. Equipartició de l'energia. Oscil·lador quàntic lineal. Gas ideal diatòmic: funcions de partició pels graus de llibertat vibracionals i rotacionals.

Tema 1.3 Propietats tèrmiques dels cristalls

Fonons i densitat d'estats vibracionals. Capacitat calorífica dels cristalls: Models d'Einstein i Debye. Expansió tèrmica. Conductivitat tèrmica. Transport iònic. Cristalls metàl·lics: el gas d'electrons, nivell de Fermi i funció de treball. Contribució electrònica a la capacitat calorífica dels cristalls. Contribució electrònica a la conductivitat tèrmica dels cristalls. Conductivitat electrònica.

Objectius específics:

Al finalitzar el bloc 1 de l'assignatura, els alumnes hauran de:

- entendre quins són els principis bàsics de la física estadística que permeten explicar la teoria macroscòpica de la termodinàmica a partir de teories microscòpiques
- reconèixer les diferències bàsiques entre les col·lectivitats canònica i microcanònica i saber deduir les propietats termodinàmiques bàsiques de sistemes de moltes partícules no interactuants en ambdues col·lectivitats
- entendre el concepte de funció de partició d'un sistema de moltes partícules i aplicar-lo al càlcul estadístic de propietats termodinàmiques
- conèixer la teoria dels gasos ideals atòmics i diatòmics i deduir-ne les seves propietats termodinàmiques bàsiques analíticament
- tenir nocions bàsiques sobre el comportament vibracional col·lectiu dels àtoms en cristalls monoatòmics
- deduir quantitats termodinàmiques fonamentals dels cristalls (e.g., energia lliure i capacitat calorífica) dintre de l'aproximació harmònica

Activitats vinculades:

Els estudiants hauran de resoldre autonomament i lliurar al professorat uns problemes sobre el contingut del tema.

Competències relacionades:

02 SCS N3. SOSTENIBILITAT I COMPROMÍS SOCIAL - Nivell 3: Tenir en compte les dimensions social, econòmica i ambiental en aplicar solucions i dur a terme projectes coherents amb el desenvolupament humà i la sostenibilitat.

06 URI N3. ÚS SOLVENT DELS RECURSOS D'INFORMACIÓ - Nivell 3: Planificar i utilitzar la informació necessària per a un treball acadèmic (per exemple, per al treball de fi de grau) a partir d'una reflexió crítica sobre els recursos d'informació utilitzats.

07 AAT N2. APRENENTATGE AUTÒNOM - Nivell 2: Dur a terme les tasques encomanades a partir de les orientacions bàsiques donades pel professorat, decidint el temps que cal emprar per a cada tasca, incloent-hi aportacions personals i ampliant les fonts d'informació indicades.

Dedicació: 70h

Grup gran/Teoria: 28h

Aprenentatge autònom: 42h



Bloc 2: Transicions de fase a l'estat sòlid i microestructura

Descripció:

Tema 2.1 Dominis magnètics

Sistemes amb ions magnètics: Paramagnetisme clàssic i quàntic. Ferromagnetisme. Model d'Ising y teoria micromagnètica.

Tema 2.2 Transicions de fase estructurals i microestructura

Signatura termodinàmica de les transicions de fase. Classificació d'Ehrenfest. Teoria de Landau. Interaccions de llarg abast. Autoacomodació i microestructura. Efecte de memòria de forma i superelasticitat.

Tema 2.3 Acoblament magnetoestructural

Anisotropia magnetocristalina i acoblament magnetoelàstic. Magnetoestricció. Metamagnetisme. Efectes calòrics i multicalòrics. Memòria de forma magnètica i superelasticitat magnètica.

Tema 2.4 Estabilitat de fases.

Equilibri de fases. Diagrames de fases topològics. Aplicacions en fàrmacs.

Objectius específics:

A l'acabar el bloc 2, els estudiants seran capaços de:

- identificar i classificar els materials segons el seu comportament magnètic.
- identificar les magnituds físiques rellevants (paràmetres d'ordre) i les propietats termodinàmiques en transicions de fase.
- Identificar i caracteritzar el comportament ferroelàstic d'un material, la seva microestructura i el seu origen.
- Identificar i caracteritzar el comportament magnetoestructural en materials amb fort acoblament.
- Identificar aplicacions derivades de les propietats anteriors.

Activitats vinculades:

Els estudiants hauran de resoldre autonomament i lliurar al professorat uns problemes sobre el contingut del tema.

Competències relacionades:

02 SCS N3. SOSTENIBILITAT I COMPROMÍS SOCIAL - Nivell 3: Tenir en compte les dimensions social, econòmica i ambiental en aplicar solucions i dur a terme projectes coherents amb el desenvolupament humà i la sostenibilitat.

06 URI N3. ÚS SOLVENT DELS RECURSOS D'INFORMACIÓ - Nivell 3: Planificar i utilitzar la informació necessària per a un treball acadèmic (per exemple, per al treball de fi de grau) a partir d'una reflexió crítica sobre els recursos d'informació utilitzats.

07 AAT N2. APRENTATGE AUTÒNOM - Nivell 2: Dur a terme les tasques encomanades a partir de les orientacions bàsiques donades pel professorat, decidint el temps que cal emprar per a cada tasca, incloent-hi aportacions personals i ampliant les fonts d'informació indicades.

Dedicació: 28h

Grup gran/Teoria: 16h

Aprentatge autònom: 12h



Bloc 3. Propietats microscòpiques i macroscòpiques de la matèria tova

Descripció:

Tema 3.1 Introducció al desordre i graus de llibertat mol·leculars

Graus de llibertat orientacionals i conformacionals. Introducció a les mesofases. Transport de càrrega i aplicacions de dispositius electroquímics. Anàlisi dinàmic mecànic i espectroscopia dielèctrica.

Tema 3.2 Vidres estructurals i orientacionals

Líquids vitris, sòlids desordenats orientacionals i cristalls plàstics. Transició vítreia, dinàmica de les relaxacions primària i secundària. Embelliment de fases vítrees.

Tema 3.3 Materials polimèrics

Fases lineals dels polímers. Polímers conductors i fibres polimèriques. Model de l'estat rotacional isomèric. La cadena equivalent de Kuhn. Relaxacions i transicions vítrees en polímers amorfs i semicristal·lins, relació amb la viscoelasticitat. Gomes i elasticitat entròpica.

Tema 3.4 Cristalls líquids i fases autoorganitzables

Cristalls líquids termotròpics, cristalls líquids polimèrics i fibres. Introducció a sistemes binaris. Gels polimèrics, mol·lècules amfílques i blocs de copolímers: autoorganització i cristalls liotròpics. Aplicacions (dispositius de cristall líquid, armadures antibales, supercondensadors, OLEDs, dispensador de fàrmacs) i materials orgànics de rellevància biològica.

Objectius específics:

Al finalitzar el bloc 3 de l'assignatura, els alumnes podran:

- predeterminar els tipus de fase condensada que poden ser formades per constituents elementals (p. ex. molècules) en base a la seva forma i dimensions, i quines fases se observaran a alta i baixa temperatura;
- exposar la teoria de la resposta lineal i de les tècniques experimentals més utilitzades per al estudi de les fases moleculars i macromoleculars;
- discutir el grau de desordre i la dinàmica molecular en les diferents fases o el seu impacte a les propietats mecàniques i reològiques;
- expressar l'ordre orientacional dels cristalls líquids mitjançant el paràmetre d'ordre nemàtic, i descriure la seva relació amb la anisotropia en les propietats reològiques, dielèctriques i òptiques de la fase nemàtica;
- fer servir models de camí aleatori, autosimilaritat, deformació afí i elasticitat entròpica, per descriure la dinàmica i les propietats dielèctriques i mecàniques dels polímers lineals i dels elastòmers;
- classificar les transicions de fase, i descriure la fenomenologia de la transició vítria en sistemes diversos com els vidres estructurals, els cristalls líquids, els cristalls plàstics i els polímers, i també la cristal·lització de fases amorfes

Activitats vinculades:

Els estudiants hauran de resoldre autonomament i lliurar al professorat uns problemes sobre el contingut del tema.

Competències relacionades:

02 SCS N3. SOSTENIBILITAT I COMPROMÍS SOCIAL - Nivell 3: Tenir en compte les dimensions social, econòmica i ambiental en aplicar solucions i dur a terme projectes coherents amb el desenvolupament humà i la sostenibilitat.

06 URI N3. ÚS SOLVENT DELS RECURSOS D'INFORMACIÓ - Nivell 3: Planificar i utilitzar la informació necessària per a un treball acadèmic (per exemple, per al treball de fi de grau) a partir d'una reflexió crítica sobre els recursos d'informació utilitzats.

07 AAT N2. APRENENTATGE AUTÒNOM - Nivell 2: Dur a terme les tasques encomanades a partir de les orientacions bàsiques donades pel professorat, decidint el temps que cal emprar per a cada tasca, incloent-hi aportacions personals i ampliant les fonts d'informació indicades.

Dedicació: 40h

Grup gran/Teoria: 16h

Aprenentatge autònom: 24h

SISTEMA DE QUALIFICACIÓ

La nota final de cada alumne es calcula amb la mitjana ponderada de les notes obtingudes a partir de la resolució d'exercicis guiats i autònoms proposats pels professors durant el curs. Els percentatges seran:

Resolució d'exercicis de Tema 1: 40%

Resolució d'exercicis de Tema 2: 30%

Resolució d'exercicis de Tema 3: 30%

No es preveu prova de reavaluació.

NORMES PER A LA REALITZACIÓ DE LES PROVES.

Els estudiants realitzaran la resolució dels problemes de manera individual i autònoma fora de l'horari lectiu i hauran d'entregar les resolucions dins del plaç establert pels professors.

BIBLIOGRAFIA

Bàsica:

- Sears, Francis Weston; Salinger, Gerhard L. Termodinámica, teoría cinética y termodinámica estadística. 2ª ed. Barcelona [etc.]: Reverté, DL 1978. ISBN 9788429141610.
- White, Mary Anne. Physical properties of materials. 2nd ed. Boca Raton (Florida): CRC Press, cop. 2012. ISBN 9781439866511 (CART.).
- Wadhawan, Vinod. Introduction to ferroic materials. CRC Press, 2000. ISBN 9789056992866.
- Jones, Richard A. L. Soft condensed matter. Oxford [etc.]: Oxford University Press, 2002. ISBN 9780198505891.
- Doi, Masao. Soft matter physics. Oxford: Oxford University Press, 2013. ISBN 9780199652952.
- Strobl, Gert. The Physics of Polymers : concepts for understanding their structures and behavior [en línia]. Berlin Heidelberg New York: Springer Verlag, 2007 [Consulta: 14/09/2022]. Disponible a: <https://ebookcentral-proquest-com.recursos.biblioteca.upc.edu/lib/upcatalunya-ebooks/detail.action?pg-origsite=primo&docID=3062750>. ISBN 9783540252788.

Complementària:

- Marder, Michael P. Condensed matter physics. 2nd ed. John Wiley & Sons, 2010. ISBN 9780470617984.
- Salje, Ekhard K. H. Phase transitions in ferroelastic and co-elastic crystals : an introduction for mineralogists, material scientists, and physicists. Cambridge [etc.]: Cambridge University Press, 1993. ISBN 0521384494.
- Planes, Antoni; Mañosa, Lluís; Saxena, Avadh. Magnetism and structure in functional materials : workshop of the Interplay of Magnetism and Structure in Functional Materials, held at the Benasque center for Science in the Pyrenees mountains, February, 9-13, 2004. Berlin: Springer, 2005. ISBN 9783540236726.

RECURSOS

Altres recursos:

Al llarg del curs es proporcionaran a l'estudiantat els apunts de la assignatura.