Guía docente
295914 - FMF - Fundamentos de los Materiales Funcionales

Última modificación: 23/01/2025

Unidad responsable: Escuela de Ingeniería de Barcelona Este
Unidad que imparte: 748 - FIS - Departamento de Física.

Titulación: GRADO EN INGENIERÍA MECÁNICA (Plan 2009). (Asignatura optativa).
GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA (Plan 2009). (Asignatura optativa).
GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES (Plan 2010). (Asignatura optativa).

Curso: 2024 **Créditos ECTS:** 6.0 **Idiomas:** Inglés

PROFESORADO

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

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

CAPACIDADES PREVIAS

Se recomienda haber cursado las asignaturas de Metalurgia Física, Propiedades Eléctricas y Magnéticas de los Materiales, Propiedades Mecánicas de los Materiales y Propiedades Ópticas, Térmicas y Acústicas de los Materiales.

COMPETENCIAS DE LA TITULACIÓN A LAS QUE CONTRIBUYE LA ASIGNATURA

Transversales:
02 SCS N3. SOSTENIBILIDAD Y COMPROMISO SOCIAL - Nivel 3: Tener en cuenta las dimensiones social, económica y ambiental al aplicar soluciones y llevar a cabo proyectos coherentes con el desarrollo humano y la sostenibilidad.
06 URI N3. USO SOLVENTE DE LOS RECURSOS DE INFORMACIÓN - Nivel 3: Planificar y utilizar la información necesaria para un trabajo académico (por ejemplo, para el trabajo de fin de grado) a partir de una reflexión crítica sobre los recursos de información utilizados.
07 AAT N2. APRENDIZAJE AUTÓNOMO - Nivel 2: Llevar a cabo las tareas encomendadas a partir de las orientaciones básicas dadas por el profesorado, decidiendo el tiempo que se necesita emplear para cada tarea, incluyendo aportaciones personales y ampliando las fuentes de información indicadas.

METODOLOGÍAS DOCENTES

Teoría y estudio de casos: El profesor presenta los conceptos fundamentales y algunas demostraciones, complementando con ejemplos clave y la discusión de algunas aplicaciones.

OBJETIVOS DE APRENDIZAJE DE LA ASIGNATURA

Al acabar el curso, el alumno debe ser capaz de:
- Conocer las propiedades funcionales de los materiales y sus aplicaciones, en particular relacionadas con la energía, la química, la biomedicina y los sensores y actuadores, y su comportamiento bajo la acción de campos externos.
- Disponer de la capacidad para abordar problemas conceptuales de los retos de las tecnologías actuales y futuras en los diversos dominios de ingeniería relacionados con los materiales funcionales.

HORAS TOTALES DE DEDICACIÓN DEL ESTUDIANTADO

Tipo	Horas	Porcentaje
Horas grupo mediano	60,0	40.00
Horas aprendizaje autónomo	90,0	60.00

Dedicación total: 150 h

CONTENIDOS

Bloque 1: Transiciones de fase y materiales ferroicos: fundamentos y aplicaciones

Descripción:
Tema 1.1 Introducción a las transiciones de fase: clasificación termodinámica, mecanística y cinética. Estabilidad de fases y aplicación en fármacos.
Tema 1.2 Transiciones de fase ferroelásticas: Introducción a la elasticidad. Introducción a la teoría de Landau. Autoacomodación y microestructura. Propiedades funcionales: Efecto de memoria de forma y superelasticidad.
Tema 1.3 Micromagnetismo. Acoplamiento magnetoelástico y efecto memoria de forma magnético. Sistemas magnetoestructurales y superelasticidad magnética.
Tema 1.4 Efectos calóricos en estado sólido. Aplicaciones en refrigeración y bombas de calor.

Objetivos específicos:
Al terminar el bloque 1, los estudiantes serán capaces de:
- identificar y caracterizar las distintas fases de un material, su estabilidad y propiedades termodinámicas.
- Identificar y caracterizar el comportamiento ferroelástico de un material y su microestructura.
- Identificar y caracterizar el ensamblaje magnetostructural.
- Identificar aplicaciones derivadas de las anteriores propiedades.

Actividades vinculadas:
Los estudiantes tendrán que resolver de forma autónoma y entregar al profesorado problemas sobre el contenido del tema.

Competencias relacionadas:
02 SCS N3. SOSTENIBILIDAD Y COMPROMISO SOCIAL - Nivel 3: Tener en cuenta las dimensiones social, económica y ambiental al aplicar soluciones y llevar a cabo proyectos coherentes con el desarrollo humano y la sostenibilidad.
06 URI N3. USO SOLVENTE DE LOS RECURSOS DE INFORMACIÓN - Nivel 3: Planificar y utilizar la información necesaria para un trabajo académico (por ejemplo, para el trabajo de fin de grado) a partir de una reflexión crítica sobre los recursos de información utilizados.
07 AAT N2. APRENDIZAJE AUTÓNOMO - Nivel 2: Llevar a cabo las tareas encomendadas a partir de las orientaciones básicas dadas por el profesorado, decidiendo el tiempo que se necesita emplear para cada tarea, incluyendo aportaciones personales y ampliando las fuentes de información indicadas.

Dedicación: 50h
Grupo grande/Teoría: 20h
Aprendizaje autónomo: 30h

Bloque 2: Materiales energéticos: fundamentos y aplicaciones

Descripción:
Tema 2.1: Introducción al transporte de calor y carga.
Portadores de calor, Ley de Fourier, Ecuación de transporte de Boltzmann, Fonones de red, Semiconductores y metales, Superconductividad

Tema 2.2: Materiales termoeléctricos
El efecto Seebeck, Mérito termoeléctrico (figura de mérito), Ejemplos y aplicaciones

Tema 2.3: Materiales para almacenamiento de energía
Superionicidad y electrolitos en estado sólido, Materiales electroquímicos para cátodos y ánodos de baterías, Compuestos para almacenamiento de hidrógeno, Materiales para pilas de combustible y catalizadores

Tema 2.4: Materiales fotovoltaicos y fotocatalíticos
Dispositivos de celdas solares, Materiales absorbentes de luz y de contacto selectivo, Electrólisis y producción de hidrógeno fotoinducida, Materiales fotocatalíticos

Tema 2.5: Materiales ferroeléctricos
Simetría cristalina y polarización ferroeléctrica, Dominios ferroeléctricos y bucles P-E, Dominios a nanoescala: Skyrmions ferroeléctricos, Piroelectricidad y piezoelectricidad, Flexoelectricidad

Objetivos específicos:
1. Comprender los fundamentos del transporte de calor y carga
Describir los portadores de calor y su comportamiento según la ley de Fourier.
Explicar la ecuación de transporte de Boltzmann y su aplicación a los fonones de red.
Diferenciar entre el transporte de calor y carga en semiconductores, metales y superconductores.

2. Analizar materiales termoeléctricos y sus aplicaciones
Comprender el efecto Seebeck y su papel en la termolectricidad.
Evaluar la figura de mérito termoeléctrica y su impacto en la eficiencia de los materiales.
Identificar ejemplos y aplicaciones de materiales termoeléctricos.

3. Explorar materiales para el almacenamiento de energía
Explicar la superionicidad y el papel de los electrolitos en estado sólido.
Describir los materiales clave para cátodos, ánodos y almacenamiento de hidrógeno.
Comprender los principios de las pilas de combustible y los materiales utilizados como catalizadores.

4. Investigar materiales fotovoltaicos y fotocatalíticos
Comprender la estructura y el funcionamiento de los dispositivos de celdas solares.
Describir los materiales absorbentes de luz y su papel en la conversión de energía.
Analizar los procesos de producción de hidrógeno fotoinducida y fotocatálisis.

5. Desarrollar una comprensión integral de los materiales ferroeléctricos
Definir la simetría cristalina y su conexión con la polarización ferroeléctrica.
Explicar las propiedades de los dominios ferroeléctricos, incluidos los bucles P-E y características a nanoescala como los skyrmions.
Explorar fenómenos relacionados como la piroelectricidad, la piezoelectricidad y la flexoelectricidad.

6. Aplicar conocimientos mediante la resolución de problemas
Resolver problemas prácticos relacionados con el transporte de calor, el almacenamiento de energía y las propiedades de los materiales.
Aplicar conceptos teóricos a ejemplos del mundo real en ciencia de materiales y energía.

Actividades vinculadas:
Los estudiantes deberán resolver de forma independiente y entregar al personal docente un conjunto de problemas relacionados con el contenido del tema.

Dedicación: 50h
Grupo grande/Teoría: 20h
Aprendizaje autónomo: 30h

Bloque 3. Materiales funcionales desordenados y poliméricos: fundamentos y aplicaciones

Descripción:
Tema 3.1 – Introducción a los materiales (dinámicamente) desordenados
1.1 Constituyentes moleculares y macromoleculares y su dinámica; Vidrios y mesofases
1.2 Entropía y distribución de Boltzmann, aplicación a cristales orientacionalmente desordenados
1.3 Cristales plásticos para aplicaciones energéticas
1.4 Propiedades eléctricas y mecánicas de los materiales desordenados: conductores iónicos y viscoelasticidad

Tema 3.2 – Los vidrios
2.1 Solidificación: cristalización o transición vítrea y envejecimiento
2.2 Teoría de Adam-Gibbs y correlación dinámico-termodinámica
2.3 Variedad de sólidos amorfos y sus aplicaciones mecánicas, catalíticas y ópticas
2.4 Vidrios monocomponentes y multicomponentes, relevancia farmacéutica

Tema 3.3 – Los materiales poliméricos y sus aplicaciones
3.1 Materiales poliméricos amorfos y semicristalinos; conformación de polímeros lineales: teoría de Miller y cadenas ideales de Kuhn
3.2 Propiedades mecánicas: relajaciones normales (Rouse) y segmentales; viscoelasticidad de los polímeros lineales
3.3 Elastómeros e hidrogeles: elasticidad entrópica, aplicaciones mecánicas y energéticas
3.4 Polímeros y fibras de cristal líquido, copolímeros de bloque, materiales compuestos y dispersiones poliméricas amorfas, y sus aplicacione

Objetivos específicos:
Al acabar el bloque 3 de la asignatura los alumnos sabrán:
- predeterminar los tipos de fases condensadas que pueden formar constituyentes elementales (p .ej. moléculas) en base a su forma y dimensión, y cuáles fases se observarían a alta y baja temperatura;
- exponer las técnicas experimentales más utilizadas para el estudio de las fases moleculares y macromoleculares;
- discutir el grado de desorden y la dinámica molecular en las varias fases y sus impacto en las propiedades mecánicas y reológicas de las mismas;
- utilizar modelos de camino aleatorio, autosimilaridad, deformación afín y elasticidad entrópica, para describir las propiedades dieléctricas y mecánicas de los polímeros lineales y de los elastómeros;
- clasificar las transiciones de fase, y describir la fenomenología de la transición vítrea en varios sistemas como vidrios estructurales, cristales líquidos y cristales plásticos, y polímeros, así como de la cristalización de fases amorfas.
- describir las principales aplicaciones de los vidrios i de los polímeros sintéticos.

Actividades vinculadas:
Los estudiantes tendrán que resolver de forma autónoma y entregar al profesorado unos cuantos problemas sobre el contenido del tema.

Competencias relacionadas:
02 SCS N3. SOSTENIBILIDAD Y COMPROMISO SOCIAL - Nivel 3: Tener en cuenta las dimensiones social, económica y ambiental al aplicar soluciones y llevar a cabo proyectos coherentes con el desarrollo humano y la sostenibilidad.
06 URI N3. USO SOLVENTE DE LOS RECURSOS DE INFORMACIÓN - Nivel 3: Planificar y utilizar la información necesaria para un trabajo académico (por ejemplo, para el trabajo de fin de grado) a partir de una reflexión crítica sobre los recursos de información utilizados.
07 AAT N2. APRENDIZAJE AUTÓNOMO - Nivel 2: Llevar a cabo las tareas encomendadas a partir de las orientaciones básicas dadas por el profesorado, decidiendo el tiempo que se necesita emplear para cada tarea, incluyendo aportaciones personales y ampliando las fuentes de información indicadas.

Dedicación: 50h
Grupo grande/Teoría: 20h
Aprendizaje autónomo: 30h

SISTEMA DE CALIFICACIÓN

La nota final de cada alumno se calcula por una media ponderada de las notas obtenidas a partir de la resolución de ejercicios guiados y autónomos propuestos por los profesores durante el curso. Los porcentajes serán:

Resolución de ejercicios de Tema 1: 33%
Resolución de ejercicios de Tema 2: 33%
Resolución de ejercicios de Tema 3: 33%

No se realizará prueba de reevaluación.

NORMAS PARA LA REALIZACIÓN DE LAS PRUEBAS.

Los estudiantes realizarán la resolución de los problemas de manera individual y autónoma fuera del horario lectivo y tendrán que entregar las resoluciones dentro del plazo establecido por los profesores.

BIBLIOGRAFÍA

Básica:

- 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 línea]. 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?pq-origsite=primo&docID=3062750. ISBN 9783540252788.

Complementaria:

- 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 al the Benasque center for Science in the Pyrenees mountainsm, February, 9-13, 2004. Berlin: Springer, 2005. ISBN 9783540236726.

RECURSOS

Otros recursos:
A lo largo del curso se proporcionarán los apuntes de la asignatura.