



Guía docente

295914 - FMF - Fundamentos de los Materiales Funcionales

Última modificación: 27/05/2024

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:
CLAUDIO CAZORLA SILVA - M10
POL MARCEL LLOVERAS MUNTANE - 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 ha de ser capaz de:

- Conocer los fundamentos de propiedades funcionales de materiales, en particular relacionadas con la energía, la química y la biomedicina, 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 dominios de la ingeniería de los materiales



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. Fundamentos físicos de las propiedades térmicas de los materiales

Descripción:

Tema 1.1 Introducción a la física estadística

Macroestados y microestados. Entropía y probabilidad termodinámica. Funciones de distribución: Fermi-Dirac, Bose-Einstein y Maxwell-Boltzmann. Función de partición y propiedades termodinámicas.

Tema 1.2 Propiedades térmicas del gas ideal

Gas ideal monoatómico. Interpretación estadística del trabajo y el calor. Equipartición de la energía. Oscilador cuántico lineal. Gas ideal diatómico: funciones de partición para los grados de libertad vibracionales y rotacionales.

Tema 1.3 Propiedades térmicas de los cristales

Fonones y densidad de estados vibracionales. Capacidad calorífica: Modelos de Einstein y Debye. Expansión térmica. Conductividad térmica. Transporte iónico. Cristales metálicos: el gas de electrones, nivel de Fermi y función de trabajo. Contribución electrónica a la capacidad calorífica de los cristales. Contribución electrónica a la conductividad térmica de los cristales. Conductividad electrónica.

Objetivos específicos:

Al finalizar el bloque 1 de la asignatura, los alumnos deberán:

- entender los principios básicos de la física estadística que permiten explicar la teoría macroscópica de la termodinámica a partir de teorías microscópicas
- reconocer las diferencias básicas entre las colectividades canónica y microcanónica y saber deducir las propiedades termodinámicas básicas de sistemas de muchas partículas no interactuantes en ambas colectividades
- entender el concepto de función de partición de un sistema de muchas partículas y aplicar lo al cálculo estadístico de propiedades termodinámicas
- conocer la teoría de los gases ideales atómicos y diatómicos y saber deducir sus propiedades termodinámicas básicas analíticamente
- tener nociones básicas sobre el comportamiento vibracional colectivo de los átomos en cristales monoatómicos
- saber deducir cantidades termodinámicas fundamentales de cristales (e.g., energía libre y capacidad calorífica) dentro de la aproximación harmónica

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: 70h

Grupo grande/Teoría: 28h

Aprendizaje autónomo: 42h

Bloque 2: Transiciones de fase en el estado sólido y microestructura

Descripción:

Tema 2.1 Dominios magnéticos.

Sistemas de iones magnéticos: Paramagnetismo clásico y cuántico. Ferromagnetismo. Modelo de Ising y teoría micromagnética.

Tema 2.2 Transiciones de fase estructurales y microestructura.

Características termodinámicas de las transiciones de fase. Clasificación de Ehrenfest. Teoría de Landau. Interacciones de largo alcance. Autoacomodación y microestructura. Efecto de memoria de forma y superelasticidad.

Tema 2.3 Acoplamiento magnetoestructural.

Anisotropía magnetocristalina y acoplamiento magnetoelástico. Magnetoestricción. Metamagnetismo. Efectos calóricos y multicalóricos. Memoria de forma magnética y superelasticidad magnética.

Tema 2.4 Estabilidad de fases.

Equilibrio de fases. Diagramas de fases topológicos. Aplicaciones en fármacos

Objetivos específicos:

Al acabar el bloque 2, los estudiantes serán capaces de:

- identificar y clasificar los materiales según su comportamiento magnético.
- identificar las magnitudes físicas relevantes (parámetros de orden) y las propiedades termodinámicas en transiciones de fase.
- Identificar y caracterizar el comportamiento ferroelástico de un material, su microestructura y su origen.
- Identificar y caracterizar el comportamiento magnetoestructural en materiales con fuerte acoplamiento.
- Identificar aplicaciones derivadas de las propiedades anteriores.

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: 28h

Grupo grande/Teoría: 16h

Aprendizaje autónomo: 12h

Bloque 3. Propiedades microscópicas y macroscópicas de la materia blanda

Descripción:

Tema 3.1 Introducción al desorden y los grados de libertad moleculares

Grados de libertad orientacionales y conformacionales. Introducción a las fases mesoscópicas. Transporte de carga y aplicaciones de dispositivos electroquímicos. Análisis dinámico mecánico y espectroscopía dieléctrica.

Tema 3.2 Vidrios estructurales y orientacionales

Líquidos vítreos, sólidos desordenados orientacionales y cristales plásticos. Transición vítrea, dinámica de las relajaciones primaria y secundaria. Envejecimiento de fases vítreas.

Tema 3.3 Materiales poliméricos

Fases lineales de los polímeros. Polímeros conductores y fibras poliméricas. Modelo del estado rotacional isomérico. La cadena equivalente de Kuhn. Relajaciones y transiciones vítreas en polímeros amorfos y semicristalinos, relación con la viscoelasticidad. Gomas y elasticidad entrópica.

Tema 3.4 Cristales líquidos y fases autoorganizables

Cristales líquidos termotrópicos, cristales líquidos poliméricos y fibras. Introducción a sistemas binarios. Geles poliméricos, moléculas anfífilas y bloques de co-polímeros: auto-organización y cristales lyotrópicos. Aplicaciones (dispositivos de cristal líquido, chalecos antibalas, supercondensadores, OLEDs, dispensadores de fármacos) y materiales orgánicos de relevancia biológica.

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 la teoría de la respuesta lineal y de 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 impactos en las propiedades mecánicas y reológicas de las mismas;
- expresar el orden orientacional de los cristales líquidos a través del parámetro de orden nemático, y saberlo relacionar con la anisotropía de las propiedades reológicas, dieléctricas y ópticas de la fase nemática;
- 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

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: 40h

Grupo grande/Teoría: 16h

Aprendizaje autónomo: 24h

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: 40%

Resolución de ejercicios de Tema 2: 30%

Resolución de ejercicios de Tema 3: 30%

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?pg-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 at the Benasque center for Science in the Pyrenees mountains, February, 9-13, 2004. Berlin: Springer, 2005. ISBN 9783540236726.

RECURSOS

Otros recursos:

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