PROGRAMA

ESTRUCTURA DE LOS MATERIALES

INGENIERO DE MATERIALES

Curso 2009/2010

Asignatura troncal: 9 créditos

(6 créditos teóricos + 3 créditos prácticas-seminarios)

Profesor: Francisco Flores Céspedes

Área de Química Inorgánica

OBJETIVOS:

Con el estudio de "Estructura de los Materiales" se pretende que el alumno tenga los conocimientos necesarios para poder interpretar las propiedades de los materiales y además le sirvan de base para posteriores estudios particulares de los mismos.

Observando la estructura de los materiales se puede obtener abundante información acerca del mismo. Aunque hay muchos niveles de estructura (e.g., atómica, molecular, macroscópica), muchas de las características físicas de un material se pueden relacionar directamente con el arreglo atómico y los tipos de enlace que dan lugar a ese material.

Comenzaremos repasando algunos principios químicos generales que nos ayudarán en nuestra descripción de la estructura de un material. Repasaremos temas tales como la estructura atómica, clasificación periódica, tipos de enlace, y diagramas de energía potencial, esta información será usada para estudiar posteriormente las categorías específicas de los materiales más detalladamente: metales, cerámicas, polímeros y compuestos.

Objetivos Específicos

1.- Identificar como varían en la tabla periódica propiedades tales como: Potencial de Ionización, afinidad electrónica, electronegatividad y radio atómico o radio iónico.

2.- Identificar el tipo de enlace en un compuesto.

3.- Utilizar los conceptos de las teorías de orbitales moleculares e hibridación para explicar los enlaces múltiples, ángulo de enlace, diamagnetismo y paramagnetismo.

4.- Identificar los siete sistemas cristalinos y las 14 redes de Bravais.

5.- Calcular el volumen de una celda unitaria a partir de los vectores de translación de la red.

6.- Calcular la densidad atómica en una dirección, plano y volumen de una celda unitaria.

7.- Calcular la densidad de un compuesto a partir de su estructura cristalina y su masa molecular.

8.- Localizar e identificar las posiciones intersticiales en una estructura cristalina.

9.- Asignar las coordenadas de posición, los índices de dirección y los índices de Miller de un plano en una celda unitaria.

10.- Usar la Ley de Bragg para calcularla distancia interplanar a partir del ángulo de difracción y viceversa.

11.- Comprender e interpretar un patrón de difracción de rayos X.

12.- Identificar los tipos de defectos en un sólido cristalino.

13.- Calcular la concentración de defectos puntuales en sólidos.

14.- Describir los defectos cristalinos como ecuaciones utilizando la notación de Kroger-Vink.

15.- Dibujar un circuito de Burgers e identificar la dirección de propagación de una dislocación.

16.- Usar las reglas de Pauling para determinar la estabilidad de un compuesto.

17.- Predecir la estructura de un silicato a partir de la relación Si/O.

18.- Aplicar las reglas de Zachariasen para determinar la tendencia de un óxido a formar vidrios.

19.- Clasificar los polímeros de acuerdo a su estructura o formabilidad.

20.- Calcular la distribución de pesos moleculares en un material polimérico.

21.- Aplicar los principios de transición vítrea y cristalinidad a la clasificación de polímeros.

22.- Identificar las estructuras nemática, esméctica y colestérica en un cristal líquido.

23.- Identificar los componentes de un material compuesto.

24.- Predecir las propiedades de un material compuesto a partir de las propiedades de sus componentes.

PROGRAMA

Una breve descripción del contenido de esta asignatura es la siguiente: Simetría en Sólidos. Tipos de Enlace. Estructura Cristalina. Estructura Polimérica. Sólidos no Cristalinos. Defectos puntuales. Dislocaciones y Superficies. Caracterización Estructural.

Siguiendo las directrices de estos descriptores se ha elaborado el presente programa.

BLOQUE I.- INTRODUCCIÓN

Tema 1.- Materiales y propiedades de los materiales. Materiales y estructura. ¿Qué es una propiedad de un material?

BLOQUE II.- ESTRUCTURA ATÓMICA Y ENLACE QUÍMICO

Tema 2.- Estructura electrónica del átomo. Antecedentes de la mecánica cuántica. Espectros atómicos. Teoría de Borh para el átomo de hidrógeno. Principio de incertidumbre de Heisemberg. Modelo mecano-ondulatorio del electrón. Números cuánticos. Función de onda radial y angular: Orbitales atómicos. Átomos polielectrónicos. Configuraciones electrónicas. Calculo de la carga nuclear efectiva.

Tema 3.- Clasificación periódica de los elementos. Desarrollo histórico. Tabla periódica moderna: bloques, periodos y grupos. Tendencias periódicas de los

elementos: Tamaño atómico, energía de ionización, afinidad electrónica, radios iónicos, electrogenatividad.

Tema 4.- Enlace químico. Introducción. Teoría de Lewis. Enlace covalente. Forma de las moléculas: TRPECV. Momentos dipolares. Teoría del enlace de valencia. Teoría de orbitales moleculares.

Tema 5.- Estados físicos de la materia: Interacciones moleculares. El estado gaseoso. El estado líquido. Enlaces por fuerzas de Van der Waals. Enlace de hidrógeno: Evidencia y naturaleza. Importancia de este enlace en los materiales poliméricos. El estado sólido. Los materiales en función del tipo de enlace.

BLOQUE III.- ESTRUCTURA CRISTALINA

Tema 6.- Estructura cristalina Introducción. La red espacial. Redes Bidimensionales. Redes Tridimensionales. Sistemas Cristalinos. Cálculos cristalográficos.

Tema 7.- Simetría en cristalografía. Noción de simetría. Elementos y operaciones de simetría. Combinación de operaciones de simetría. Simetría puntual. Grupos puntuales de simetría.

Tema 8.- Estructuras cristalinas: Generalidades. Empaquetamiento de esferas y estructuras derivadas. Estructuras de empaquetamiento compacto. Posiciones intersticiales en estructuras de empaquetamiento compacto. Direcciones y planos cristalográficos en celdas cúbicas y hexagonales: Índices de Miller. Factor de empaquetamiento. Cálculo de densidad volumétrica, planar y lineal de celdas unidad.

Tema 9.- Estructura cristalina materiales metálicos: Introducción. Clasificación de las estructuras. Estructuras simples. Estructura de las aleaciones. Estructuras derivadas y superredes. Fases intermedias.

Tema 10.- Estructura cristalina materiales cerámicos. Introducción. Radio iónico. Energía de enlace en estructuras iónicas. Reglas para el empaquetamiento y conectividad en cristales iónicos. Estructuras iónicas de fórmula general MX. Sólidos de fórmula general MX_2. Estructura del α-Al_20_3 y $Re0_3$. Estructuras de óxidos mixtos: Espinela, perovskita e ilmenita. Estructuras laminares: Óxidos superconductores.

Tema 11.- Redes covalentes extensas. Alótropos de carbono: Diamante, grafito y furellenos. Fulleritas. Nanotubos.

Tema 12.- Estructura de los silicatos y aluminosilicatos. Polimorfos de la sílice. Silicatos: Estructura de los silicatos. Aluminosilicatos: Estructura de la caolinita. Zeolitas.

Tema 13.- Estructura de sólidos moleculares. Introducción. Cristales moleculares simples: hielo, CO_2., benceno y clartratos. Macromoléculas biológicas.

BLOQUE IV.- DEFECTOS EN LA ESTRUCTURA CRISTALINA

Tema 14.- Defectos en la estructura cristalina: Defectos puntuales. Defectos en sólidos cristalinos. Clasificación de los defectos. Defectos en sólidos iónicos. Cálculo de su concentración. Aplicaciones de estos defectos: Conductividad iónica en sólidos. Electrolitos sólidos, α-AgI, zirconia estabilizada, β-alúmina. Centros de color. Proceso fotográfico. Compuestos no estequiométricos: wustita, dióxido de uranio, monóxido de titanio. Propiedades electrónicas de los óxidos no estequiométricos.

Tema 15.- Defectos lineales. Dislocaciones: Evidencia de estos defectos. Caracterización de las dislocaciones: Vector tangente y vector de Burgers. Movimiento de las dislocaciones por deslizamiento y ascenso: Sistemas de deslizamiento: Tensión de cizalla aplicada a una dislocación. Mecanismos de reforzamiento de cristales. Generación de dislocaciones.

Tema 16.- Defectos superficiales. Superficie. Concepto de grano. Tensión superficial. Geometría de las estructuras granulares Equilibrio en las uniones interfaciales. Defectos de las interfases: Maclas, Fallos de apilamiento, Fronteras de grano de pequeño ángulo e Interfases en las fronteras de grano. Tamaño de los granos.

BLOQUE V.- CRISTALES LÍQUIDOS

Tema 17.- Cristales líquidos. Los cristales líquidos. Consideraciones generales sobre las moléculas que forman la fase líquido-cristalina. Clasificaciones. Clases estructurales de los cristales líquidos: nemática, nemática girada, esméctica, columnar. Caracterización de las distintas clases. Aplicaciones: Surfactantes, moléculas ampifílicas, pantalla de cristal líquido, termómetros.

BLOQUE VI.- ESTADO AMORFO

Tema 18.- Sólidos amorfos. El estado amorfo. Métodos de obtención de este estado. Características genéricas: Ordenamiento de corto alcance, transición vitrea, función de distribución par. Modelos para representar este estado: Modelos de esferas rígidas, rutas al azar, modelos de red. Vidrios de los calcógenos: Aplicaciones del As_2Se_3.

Tema 19.- Los vidrios. Estudio de la sílice cristalina y amorfa. Óxidos formadores de vidrios y modificadores. Estudio del diagrama de fases SiO_2-CaO-Na_2O.

Composición de los vidrios: Variación de la viscosidad con la temperatura. Fabricación de vidrios: Vidrio flotado, vidrio templado y vidrio Vycor®.

BLOQUE VII.- ESTRUCTURA POLIMÉRICA

Tema 20.- Polímeros. Introducción. Homopolímeros y copolímeros. Polímeros de adición y de condensación. Reacciones y métodos de polimerización: en cadena y por etapas. Estructura molecular. Configuración molecular, cristalina y estereoisomería. La fibra Kevlar®. Termoplásticos de uso general y técnicos. Plásticos termoestables. Elastómeros: Caucho natural y gutapercha. Vulcanización. Cauchos sintéticos.

Tema 21.- Materiales compuestos. Introducción. Fibras y matrices. Materiales compuestos de plásticos reforzados con fibras. Microestructuras de estos materiales compuestos. Procesamiento de los materiales compuestos reforzados con fibras: Materiales compuestos de fibra de carbono termoendurecidos. El hormigón. Otros materiales compuestos.

BLOQUE VIII.- CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES

Tema 22.- Técnicas de identificación y análisis estructural. Técnicas de difracción: Difracción. Difracción de rayos X de monocristales y de polvos. Ley de Bragg. Difracción de electrones y neutrones.

Tema 23.- Microscopía, espectroscopía, análisis térmico. Técnicas microscópicas: Microscopios óptico, electrónico, de campo próximo. Técnicas espectroscópicas: UV- Visible, espectroscopía vibracional: IR, espectroscopía de emisión, otras técnicas espectroscópicas. Análisis térmico: análisis termogravimétrico (TG), análisis térmico diferencial (DTA), calorimetría diferencial de barrido (DSC). Técnicas de análisis superficial.

METODOLOGÍA DE TRABAJO:

- Clases expositivas. En ellas, el profesor presentará de forma ordenada los conceptos teóricos y hechos experimentales que permitan al alumno obtener una visión global y comprensiva de la asignatura. Como apoyo, se proporcionará a los alumnos copia del material docente utilizado por el profesor, fundamentalmente transparencias. Este material estará disponible en la página web de asignatura.

- Seminarios dedicados a la resolución por los alumnos de ejercicios numéricos y cuestiones que el profesor habrá anunciado con suficiente antelación. Los ejercicios elegidos formarán parte de la colección a la que tendrán acceso los alumnos, a través de Web-CT, desde el inicio de la asignatura.

- Seminarios dedicados a la presentación por los alumnos, y posterior discusión, de artículos científicos, escritos en inglés o español. Estos artículos, seleccionados por el profesor, estarán disponibles en la página web de la asignatura.

- Ejercicios de auto-evaluación a través de internet, mediante el empleo del programa Web-CT

EVALUACIÓN:

Aspectos y/o criterios

- Conocimientos teórico-prácticos alcanzados por el alumno
- La participación activa del alumno en la presentación y discusión de artículos, ejercicios, o cualquier otra actividad programada durante el curso
- Asistencia a clase

Modalidades e instrumentos

1) Examen final de la asignatura: Consistirá en un único examen escrito. El examen podrá incluir:

    a. Cuestiones cortas consistentes en la formulación de definiciones breves y precisas de conceptos que se juzguen relevantes.

    b. Resolución de un cuestionario similar a los que se generan en los ejercicios de auto-evaluación que los alumnos tendrán a su disposición a través de Web-CT.

    c. Desarrollo de un tema, en cuya exposición, además de los contenidos concretos, se valorará la capacidad para integrar bajo una perspectiva común distintos aspectos del temario.

2) Exposición oral de trabajos.

3) Seminarios y ejercicios entregados

Sistema de puntuación / calificación

La evaluación final de los alumnos se realizará teniendo en cuenta las siguientes calificaciones:

1) La calificación del examen final (70%)

2) La participación activa del alumno en la presentación y discusión de artículos, ejercicios, o cualquier otra actividad programada (30%)

BIBLIOGRAFÍA

Bibliografía Básica:

1.- DE GRAEF, M; McHENRY, M. E. Structure of Materials: An introduction to crystallography, diffraction and symmetry. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2007.

2.- ALLEN, S. M.; THOMAS E. L. The Structure of Materials. John Wiley & Sons. Inc. Nueva York, 1999.

3.- CALLISTER, JR., W. D. Introducción a la Ciencia e Ingeniería de los Materiales, vols. 1 y 2, Reverte, Barcelona, 1995.

4.- MANGONON, P.L. Ciencia de los Materiales: Selección y Diseño. 1ª Ed., Prentice Hall, Madrid, 2001.

Bibliografía Complementaría

1.- ADAMS, D, M, Sólidos Inorgánicos. Alhambra, 1986.

2.- ALBELLA, J. M.; CINTAS, A. M.; MIRANDA, T.; SERRATOSA J. M. (coordinadores). Introducción a la Ciencia de Materiales. CSIC, Madrid, 1993.

3.- ASKELAND, D. R. The Science and Enginneering of Materials, 3th. PWS Publishing Company, 1996. Versión en castellano: Ciencia e Ingeniería de los Materiales. 3ª Ed., Internacional Thomson Editores, Madrid, 1998.

4.- KITTEL CH. Introducción a la Física del Estado Sólido. 3ª Ed. Reverté, Barcelona, 1998.

5.- MITCHELL, B. S. An Introduction to Materials Engineering and Science for Chemical and Materials Engineers. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, USA, 2004.

6.- PETRUCCI, R. H.; HARWOOD, W. S. Química General. Principios y Aplicaciones. 8ª Ed., Prentice Hall. Madrid, 2002.

7.- SHACKELFORD, J. F.; GÜEMES, A. Introducción a la Ciencia de Materiales para Ingenieros. 4ª Ed., Prentice Hall, Madrid, 1998.

8.- SMART L.; MOORE, E. Solid State Chemistry: An Introduction. 2ª Ed., Chapman & Hall, Londres 1995. Versión en castellano: Química del Estado Sólido. Una Introducción. Ed. Addison-Wesley Iberoamericana, Madrid, 1992.

9.- SMITH, W. E. Fundamentos de la Ciencia e Ingeniería de Materiales. 3ª Ed., McGraw Hill. Madrid, 1998.

10.- TILLEY, R. J. D. Crystal and Crystal Structures. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, USA, 2006.

11.- WELLS, A. F. Química Inorgánica Estructural. 4ª Ed., Reverte, Barcelona 1994.

12.- WHITTEN, K. W.; DAVIS, R. E.; PECK, M. L. Química General. 5ª Ed., McGraw Hill, Madrid, 1998.