

# QUÍMICA e INTRODUCCIÓN A LOS MATERIALES

MAESTRÍA EN CIENCIAS FÍSICAS - CIENCIA DE MATERIALES

Curso especial: materia dividida en dos módulos equivalentes a media materia cada uno.

Carga horaria: 8 horas semanales

Período: agosto-diciembre

## **Módulo 1:**

Docente: Fabiana Gennari

### **Periodicidad química**

Sistemática de las propiedades periódicas de los elementos (radio atómico, energía de ionización, afinidad electrónica y electronegatividad). Tendencias en las propiedades químicas de los elementos como función de su número atómico. Principio de singularidad. Regla de la diagonal. Efecto del par inerte. Tendencias particulares en elementos de transición. Metales, no metales y metaloides.

### **Estructura de sólidos**

Tipos de enlace. Sólidos moleculares, redes covalentes y metales. Empaquetamientos compactos y no compactos. Correlaciones entre número de coordinación y estructura en sólidos elementales. Sólidos iónicos, estructura, energía reticular, ciclo termodinámico de Born Haber. Predicción de estructuras cristalinas.

### **Clasificación de compuestos químicos y reactividad**

Clasificación e identificación de compuestos químicos. Propiedades periódicas: hidrógeno y oxígeno. Tipos de hidruros. Óxidos iónicos y covalentes. Bases y oxácidos. Nociones de Química Orgánica.

Equilibrio químico y constante de equilibrio. Factores que afectan los equilibrios. Principio de Le Chatelier. Dependencia de la constante de equilibrio con la temperatura.

Propiedades ácido-base de los óxidos y los hidróxidos. Reacciones ácido-base y de transferencia de electrones. Constante de equilibrio y fuerza de los ácidos y bases. Producto iónico del agua. Anfoterismo. Escala de pH. Constante de ionización de ácidos y bases débiles. Relaciones entre pKa, pKb y pKw. Efecto de ión común y soluciones reguladoras. Reacciones de precipitación. Constante de producto de solubilidad. Cociente de reacción. El pH y la solubilidad.

Reacciones de óxido reducción. Estados de oxidación. Celdas galvánicas: concepto de semi-reacción. Pila de Daniel. FEM. Potenciales estándar de reducción. Espontaneidad de las

reacciones redox. Efecto de la concentración. Ecuación de Nernst. Tipo de reacciones redox. Electrólisis. Corrosión. Ejemplos de interés tecnológico. Tendencias periódicas en potenciales de reducción. Metalurgia. Diagramas de Ellingham.

### **Enlace químico. Propiedades de materiales en función del tipo de enlace**

Características básicas del enlace químico: longitud, dirección y energía del enlace, en compuestos orgánicos e inorgánicos. Teorías de enlace. Orbitales moleculares. Enlaces sigma y pi. Simetría rotacional y de inversión. Orbitales moleculares deslocalizados. Mezclado s-p. Forma y energía de los orbitales. Orden de enlace. Teoría de enlace de valencia. Hibridación de orbitales y geometría molecular. Resonancia aplicada a hidrocarburos aromáticos y sistemas conjugados. Estructura electrónica, geometría y polaridad de moléculas. Efecto de la polarización sobre las propiedades de las sustancias. Relación entre enlace polar y electronegatividad. Reactividad de moléculas. Reactivos nucleofílicos y electrofílicos.

### **Fuerzas de interacción intermolecular. Predicción de propiedades físicas y químicas**

Atracción intermolecular (puente de hidrógeno, ión-dipolo, dipolo-dipolo, fuerzas de Van der Waals). Propiedades del agua y efectos estructurales asociados al puente de hidrógeno. Propiedades físicas en función de la magnitud de la fuerza de enlace. Solubilidad y estructura molecular. Energía de hidratación, energía reticular y solubilidad. Predicción de propiedades físicas y químicas sobre la base de las fuerzas intermoleculares. Relaciones entre propiedades de materiales y tipos de interacciones interatómicas e intermoleculares. Estructura y propiedades de sólidos (moleculares, iónicos, covalentes, amorfos, metales).

## **Módulo 2:**

Docentes: Fabiana Gennari, Carlos González Oliver

### **Introducción a los Materiales**

Química del estado sólido: sólidos amorfos y cristalinos, principales características. Clasificación de los materiales. Relación entre estructura y propiedades. Consideraciones en el diseño y selección de nuevos materiales.

### **Materiales Metálicos**

Tipos de aleaciones metálicas. Hierro y sus aleaciones: diagrama Fe-C. Transformaciones entre fases. Tratamientos térmicos en aceros. Influencia de los elementos aleantes sobre las propiedades. Control de la microestructura y su influencia en las propiedades. Propiedades físicas.

Propiedades mecánicas: Tensión y deformación. Deformación elástica y plástica. Módulo de Young y límite elástico. Resistencia a la tracción. Ductilidad y resiliencia. Tenacidad. Dureza. Mecanismo de endurecimiento de metales.

Propiedades eléctricas: conductividad. Materiales semiconductores. Resistividad y efecto de la temperatura. Influencia de las impurezas y la deformación. Aislantes.

Propiedades térmicas: capacidad calorífica, dilatación térmica, conductividad térmica, tensiones térmicas.

Producción de materiales metálicos: fusión y metalurgia de polvos. Procesamiento.

Corrosión en metales. Formas de corrosión y prevención. Oxidación.

### **Materiales Cerámicos**

Tipos de cerámicos: vidrios, cerámicos vítreos, refractarios, cementos, cerámicos avanzados. Silicatos. Polimorfismo.

Técnicas de fabricación de cerámicas: conformado del vidrio, conformado de partículas y cementación. Microestructura: importancia en las propiedades.

Comportamiento mecánico de cerámicos y vidrios: tenacidad, módulo de rotura.

Comportamiento elástico. Influencia de la porosidad. Dureza.

Propiedades eléctricas de los cerámicos. Portadores de carga. Transporte de iones.

Conducción en vidrios. Semiconductores y aisladores en cerámicos. Propiedades térmicas (capacidad calorífica, dilatación térmica, conductividad). Resistencia al choque térmico.

Degradación en cerámicos.

### **Materiales Poliméricos**

Concepto de material polimérico. Homopolímeros y copolímeros. Peso molecular e influencia en las propiedades. Grado de polimerización. Estructura molecular. Cristalinidad.

Síntesis de polímeros: polimerización por adición y condensación.

Termoplásticos y termorrígidos. Estado cristalino y amorfo. Transición vítrea en polímeros.

Factores que influyen la temperatura de fusión y transición vítrea.

Fabricación y procesamiento de polímeros. Aditivos en polímeros.

Propiedades de los sólidos poliméricos: elasticidad y viscoelasticidad. Propiedades mecánicas en polímeros: efecto de la temperatura, cristalinidad y peso molecular. Otras propiedades.

Elastómeros, plásticos y fibras: características y aplicaciones comerciales típicas.

Degradación.

### **Materiales compuestos**

Definición y clasificación. Interfases: mojado de una superficie. Materiales compuestos tradicionales: cementos y hormigones. Materiales compuestos avanzados: sinterizados y

reforzados (particulados, laminados y fibrados). Compuestos de matriz metálica, cerámica y polimérica: métodos de obtención, procesamiento y propiedades. Aplicaciones. Ejemplos de interés industrial.

### **Selección de Materiales**

Comparación de propiedades físicas (densidad, conductividad y expansión térmica), eléctricas (resistividad, propiedades dieléctricas) y mecánicas (módulo elástico, tenacidad, resistencia) de los diferentes tipos de materiales (poliméricos, metálicos, cerámicos y compuestos) en función del tipo de enlace. Enfoque descriptivo y comparativo. Otros materiales avanzados.

### **Bibliografía básica disponible en la biblioteca del IB**

- Chemical structure and bonding, R.L. DeKock, H.B. Gray. University Science Books, California, 1989.
- Introduction to coordination, solid state and descriptive inorganic chemistry, G.E. Rodgers, McGraw-Hill, New York, 1994.
- Advanced inorganic chemistry, F.A. Cotton, G. Wilkinson, 5<sup>th</sup> ed., Wiley, New York, 1988.
- New directions in solid state chemistry, C.N.R. Rao, J. Gopalakrishnan, 2<sup>nd</sup> ed., Cambridge University Press, 1997.
- Materials Science and Engineering: an introduction, W.D. Callister, 4<sup>th</sup> ed., Wiley, New York, 1997.
- Understanding materials science: history, properties, applications, R.E. Hummel, 2<sup>nd</sup> ed., Springer, 2004.
- Principles of extractive metallurgy, F. Habashi, Gordon and Breach, 1970.

### **Bibliografía adicional**

- Chemistry of the elements, N.N. Greenwood, A. Earnshaw, Pergamon Press, Oxford, 1994.
- Essential Trends in Inorganic Chemistry, D.M.P. Mingos, Oxford University Press, 1998.
- Properties of Materials, M.A. White, Oxford University Press, New York, 1999.
- Understanding inorganic chemistry, J. Barret, Ellis Horwood, New York, 1991.
- Fundamentos de la Ciencia e Ingeniería de Materiales, W.F. Smith, McGraw-Hill, 2006.
- Fundamentals of Materials Science and Engineering, W.D. Callister Jr, 2<sup>nd</sup> ed., J. Wiley and Sons, 2005.
- Ciencia e Ingeniería de los Materiales, D.R. Askeland, Thomson International, Buenos Aires, 2004.
- Inorganic Structural Chemistry, U. Müller, Wiley, New York, 1993.
- Química Inorgánica Básica, F.A. Cotton, G. Wilkinson, Limusa, México, 1978.
- An introduction to metal matrix composites, T.W. Clyne, P.J. Withers, Cambridge University Press, 1993.
- Thermodynamics of materials: a classical and statistical synthesis, J.B. Hudson, Wiley, 1996.
- Materiales. Estructura, propiedades y aplicaciones, J.A. Saja Sáez, M.A. Rodríguez Pérez, M.L. Rodríguez Méndez, Thomson, 2005.

### **Organización de la materia**

Las clases teóricas se desarrollan en el aula, complementadas con clases de problemas y prácticas de laboratorio.