



UNIVERSIDAD
COMPLUTENSE
MADRID

Proyecto de Innovación

Convocatoria 2018/2019

Nº de proyecto: 296

Título del proyecto: Propiedades Físicas de los Materiales Cerámicos

Yanicet Ortega Villafuerte

Facultad de Ciencias Físicas

Departamento de Física de Materiales

1. Objetivos propuestos en la presentación del proyecto

Los objetivos propuestos en este proyecto eran dos:

1. Crear un nuevo módulo dedicado a las Propiedades Físicas de los Materiales Cerámicos, que se incorporaría al programa “*Laboratorio Virtual de Materiales Cerámicos*”, iniciado durante la ejecución del proyecto PIMCD_225 (2015).
2. Adquirir el material de laboratorio necesario para poder demostrar mediante una serie de experimentos las propiedades superconductoras que presentan algunas cerámicas, a temperaturas inferiores a 77K.

2. Objetivos alcanzados

En este proyecto se alcanzó el primer objetivo, ya que era el que no dependía de financiación. Se logró diseñar y programar un nuevo módulo, en este caso relacionado con las propiedades ferroeléctricas, superconductoras, y térmicas de las cerámicas. Este objetivo se alcanzó con coste cero, al igual que en los proyectos anteriores: PIMCD – 225 - (2015) y PIMCD - 287- (2017).

Para llevar a cabo el segundo objetivo de este proyecto, se requería adquirir equipamiento experimental, razón por la que no se pudo finalmente combinar la enseñanza virtual con la experimental. Si en próximas convocatorias recibieramos financiación, podríamos retomar esta idea a través de una nueva solicitud de proyecto.

3. Metodología empleada en el proyecto

La metodología empleada en la elaboración del proyecto ha sido similar a la usada en los proyectos anteriores. Para crear una interfase sencilla de manejar para los usuarios, empleamos una programación orientada a objetos, en lenguaje Visual Basic bajo la aplicación “*Microsoft Visual Studio 2008*”.

Se adicionó al menú principal del programa un nuevo botón titulado “PROPIEDADES FÍSICAS DE LOS MATERIALES CERÁMICOS” mediante el cual se accede de forma secuencial al resto de las ventanas creadas (**Figura 1**). Inicialmente se realizó un diseño general de todas las ventanas, así como de su contenido. En el proyecto se incorporaron imágenes y videos de estructuras cristalinas de cerámicas superconductoras y ferroeléctricas, creadas con el software DIAMOND 3.1 (“*Crystal and Molecular Structure Visualization*”), con el número de licencia 1.3.4.2007253.2453.



Figura 1: Menú principal del programa

Una vez finalizada la programación, se revisó el programa y se hicieron los cambios oportunos para garantizar el correcto funcionamiento del mismo.

4. Recursos humanos

Integrantes del Proyecto:

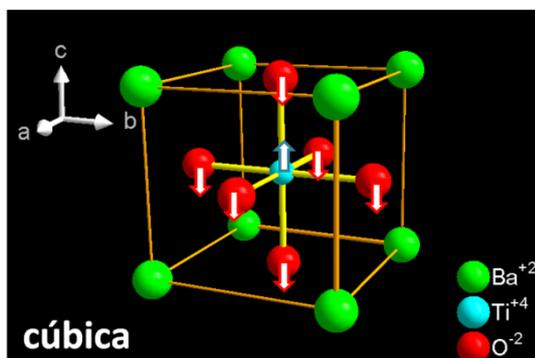
- Aitor Arredondo.
- Carlo Dexter.
- Adrián Peña.
- Tian Yao.
- Vicente Pérez.
- Jesús García.
- Yanicet Ortega.

5. Desarrollo de las actividades

Para la elaboración del proyecto se ejecutaron las distintas actividades en el siguiente orden:

Al inicio se realizó el diagrama de flujo del programa y se hizo una selección de las propiedades físicas más relevantes de las cerámicas, teniendo en cuenta sus aplicaciones más frecuentes. Para cada una de las propiedades físicas desarrolladas (ferroeléctricas, superconductoras, y térmicas) se crearon dos ventanas a las que se accede de forma secuencial desde el menú principal.

La primera ventana de cada una de las propiedades estudiadas resume las magnitudes físicas a través de las cuales se describen dichas propiedades. A continuación, usando las estructuras cristalinas cerámicas más adecuadas para cada caso, se estudiaron cómo se manifiestan en los materiales cerámicos dichas propiedades.



Específicamente, para el estudio de las **propiedades ferroeléctricas** se eligió la estructura del titanato de bario (**Figura 2**). Teniendo en cuenta los desplazamientos iónicos que se producen en su estructura cristalina, al pasar de la fase cúbica a la fase tetragonal, se determinó la dirección del vector de polarización de la primera fase ferroeléctrica de esta estructura.

Figura 2: Desplazamientos iónicos que se producen en el BaTiO3 al pasar de la fase cúbica a la fase tetragonal

De forma similar se señalaron los distintos rangos de temperatura correspondientes a las otras fases ferroeléctricas del BaTiO₃ (ortorrómbica y romboédrica).

Para el estudio de las **propiedades superconductoras** se analizó la estructura cristalina YBa₂Cu₃O_{7-x} (**Figura 3**), correspondiente a la primera cerámica de alta temperatura crítica descubierta (T_c > 77 K). En su estructura se señalaron los dos tipos de coordinación que presentan los iones de Cu y se destacó el carácter anisótropo de la superconductividad en esta estructura.

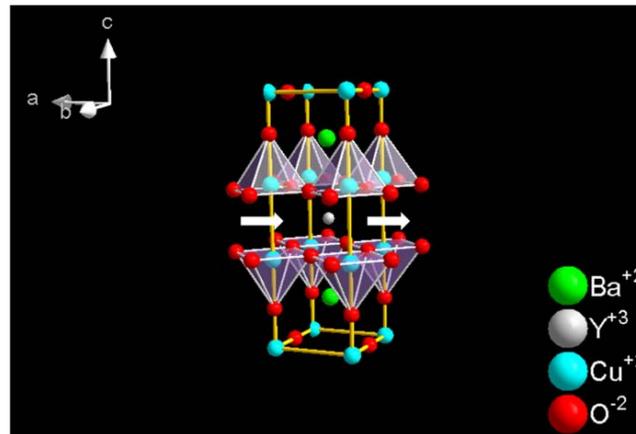


Figura 3: La figura muestra la dirección de la corriente superconductora en la estructura YBa₂Cu₃O_{7-x}

Para el estudio de las **propiedades térmicas** se definieron varias magnitudes físicas relacionadas con la cuantificación y el transporte de calor en los sólidos, tales como: calor específico, coeficiente de dilatación lineal y conductividad térmica.

Para resaltar las propiedades térmicas de las cerámicas, se compararon los valores de dichas magnitudes con las de algunos materiales metálicos. Se hizo hincapié en la relación que existe entre el coeficiente de dilatación lineal y la forma de las curvas de energía potencial en función de la distancia interatómica para ambos tipos de materiales (**Figura 4**).

PROPIEDADES TÉRMICAS

Calor específico y coeficiente de dilatación térmica

Calor específico a presión constante

- El **calor específico** es la cantidad de calor por unidad de masa, que es necesario suministrar a un material, para aumentar su temperatura en un Kelvin.

En la siguiente **tabla** se muestran los valores de calor específico a presión constante para distintos materiales. De forma general se observa que esta magnitud es mayor para los materiales cerámicos que para los metálicos.

	c_p [J/kg K]		c_p [J/kg K]
Al ₂ O ₃	775	Fe	448
MgO	940	Ni	443
MgAl ₂ O ₄	790	Cu	386

- Otra de las magnitudes físicas relacionadas con las propiedades térmicas es el coeficiente de dilatación térmico lineal (α).

La forma de la **curva de energía potencial** en función de la distancia interatómica determina la magnitud de este coeficiente, para cada material. De forma general al aumentar la temperatura, la energía vibracional es mayor y la distancia interatómica aumenta. $E_1 < E_2 < E_3 < E_4$

La mayor energía de enlace de los materiales cerámicos hace que la **curva** de energía potencial sea más profunda y estrecha, y por lo tanto más simétrica. Esto contribuye a que la distancia interatómica no varíe al aumentar la energía vibracional con el incremento de la temperatura.

Energía potencial vs distancia interatómica

Por otra parte, a través de una comparación entre los valores de la conductividad térmica entre cerámicas cristalinas y materiales metálicos, se resaltaron las diferencias que existen entre sus mecanismos de conducción de calor. De forma similar se analizaron las diferencias en el transporte de calor entre cerámicas cristalinas y amorfas.

Figura 4: Ventana dedicada al estudio de las propiedades térmicas

La última fase del proyecto se destinó a comprobar el funcionamiento correcto de los distintos módulos, enlaces y videos. Estas comprobaciones se realizaron tanto *in-situ* como remotamente.

En el próximo proyecto tenemos pensado desarrollar un nuevo módulo dedicado al análisis estadístico de los esfuerzos de fractura en los materiales cerámicos y pretendemos extender el acceso al programa “Laboratorio Virtual de Materiales Cerámicos” a un número mayor de estudiantes.