

# Máster en Ingeniería Química

## 66223 - Materiales nanoestructurados

Guía docente para el curso 2014 - 2015

**Curso: 1, Semestre: 2, Créditos: 3.0**

---

### Información básica

---

#### Profesores

- **Victor Sebastián Cabeza** victorse@unizar.es

#### Recomendaciones para cursar esta asignatura

Concluidos los estudios de grado, no se requiere de una preparación especial adicional para afrontar con éxito esta asignatura.

La asistencia regular a clase y el trabajo constante son fundamentales para que el alumno alcance de manera satisfactoria el aprendizaje propuesto. Los estudiantes disponen del profesor para su asesoramiento en tutorías personalizadas y grupales. La asignatura estará presente en el Anillo Digital Docente (ADD), por lo que es conveniente estar al día en el uso de tal plataforma.

#### Actividades y fechas clave de la asignatura

Se trata de una asignatura de 3 créditos ETCS, lo que equivale a 75 horas de trabajo del estudiante, a realizar tanto en horas presenciales como no presenciales, repartidas del siguiente modo:

- **15 horas de clase presencial**, distribuidas aproximadamente en una hora semanal. En ellas se realizará la exposición de contenidos teóricos y conceptos necesarios para la resolución de casos prácticos.
- **10 horas de aprendizaje basado en problemas y casos prácticos**, distribuidas aproximadamente en una hora cada dos semanas. En ellas se desarrollarán, con participación activa de los alumnos, problemas y casos prácticos coordinados en contenido con la evolución temporal de las exposiciones teóricas.
- **3 horas de trabajo práctico** en las que realizar búsquedas avanzadas y resolver problemas complejos mediante el uso de herramientas informáticas y en las que realizar simulaciones estructurales de materiales nanoestructurados usando softwares comerciales o libres como Diamond o Powder Cell. Estas sesiones se realizarán en horario de clase, individualmente o en parejas, según el número de alumnos o la dificultad de la tarea en particular.
- **2 horas de prácticas especiales** correspondientes a una sesión de visita a un laboratorio de investigación, charla de expertos, seminario temático, debate, etc.
- **31 horas de estudio personal y tutorías personalizadas**, repartidas a lo largo de todo el semestre.
- **11 horas de trabajos tutelados** que consistirán en la realización de tareas de desarrollo, ampliación, documentación, resolución... de casos propuestos por el profesor, basados en los conceptos vistos en el aula. Estos trabajos estarán distribuidos durante el curso, serán de realización individual o en grupo pequeño (2 alumnos) y se plasmarán en entregables (búsquedas, ejercicios, presentaciones) que serán corregidos y calificados. Aproximadamente habrá un entregable por bloque temático. Estas horas se combinarán con las 6 horas de trabajo práctico arriba mencionadas.
- **3 horas de pruebas de evaluación**, correspondientes a una presentación individual de hasta 15 minutos de duración y que se realizará hacia el final del periodo de clases presenciales.

El calendario de la asignatura se adaptará al establecido en la Escuela de Ingeniería y Arquitectura (EINA), así como sus

## Inicio

---

## Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

**El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados...**

**1:**

Sabe distinguir entre las diferentes familias de materiales nanoestructurados y reconoce sus miembros fundamentales, así como sus propiedades más relevantes.

**2:**

Desarrolla la capacidad de relacionar las propiedades estructurales de los materiales con sus posibles aplicaciones en el campo de la Ingeniería Química.

**3:**

Diseña procedimientos de síntesis y caracterización adecuados para los materiales más representativos.

**4:**

Domina el uso de un programa de simulación de estructuras.

**5:**

Analiza la composición química, textura y propiedades físicas como fundamento de las aplicaciones de los materiales.

**6:**

Aplica lo aprendido sobre materiales estructurados a la búsqueda de soluciones relacionadas con la ingeniería de producto.

## Introducción

### Breve presentación de la asignatura

Los materiales nanoestructurados tienen muchas facetas, de modo que entre ellos destacan los sólidos porosos (materiales amorfos, zeolitas y afines, MOFs), los materiales carbonosos (algunos pueden ser porosos como los carbones activos, mientras que otros como el grafeno tienen una gran relevancia científica e incluso social por las expectativas que despiertan), las nanopartículas y los compuestos o nanocompuestos. Algunos de estos materiales como las zeolitas y los carbones han estado en la primera línea de avance de la Ingeniería Química durante el pasado siglo, de otros se espera que catapulten el desarrollo de una química aplicada más sostenible, eficaz y económica. Se pondrá cierto énfasis en abordar la ya preocupante nanotoxicidad que vuelve de algún modo sospechosos a algunos de estos materiales.

---

## Contexto y competencias

---

## Sentido, contexto, relevancia y objetivos generales de la asignatura

**La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:**

El objetivo primordial es que el alumno sepa distinguir entre las diferentes familias de materiales nanoestructurados y reconocer sus miembros fundamentales, así como sus propiedades más relevantes. Conocer sus propiedades y el lugar que ocupan en la secuencia de innovación para de este modo poder tomar una decisión sobre su posible idóneo uso en una aplicación ya existente o en un nuevo proceso por definir y/o explotar. Otro objetivo es que el alumno pueda usar de forma transversal diversos conocimientos ya adquiridos tanto en el grado como en otras asignaturas del máster, sobre todo

aquellos relativos a la estructura química de los materiales, operaciones de separación, ingeniería de las reacciones químicas, etc.

## **Contexto y sentido de la asignatura en la titulación**

La asignatura de Materiales Nanoestructurados forma parte de la optatividad en la materia Técnicas y Campos de Investigación en Ingeniería Química, y es idónea para alumnos que quieran adquirir un itinerario formativo encaminado a la investigación. En ella se parte de conocimientos básicos transversales que el alumno ha adquirido en sus estudios de grado y en los propios de máster en curso. El contexto es el de la propia Ingeniería Química en su versión más expuesta hacia los nuevos materiales y sus demandantes nuevas aplicaciones que deberían traducirse en nuevos productos, generadores antes o después de negocio y empuje económico, y lo que se podría llamar ingeniería de producto frente a la más obvia ingeniería de proceso. El contexto puede considerarse también plenamente multidisciplinar, pues el alumno deberá poner en juego simultáneamente sus conocimientos de química, física, operaciones de separación y reactores químicos, técnicas de análisis y caracterización, conocimiento de aplicaciones informáticas, etc.

## **Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...**

### **1: Competencias Genéricas**

- Capacidad para aplicar el método científico y los principios de la ingeniería y economía, para formular y resolver problemas complejos en procesos, equipos, instalaciones y servicios, en los que la materia experimente cambios en su composición, estado o contenido energético, característicos de la industria química y de otros sectores relacionados entre los que se encuentran el farmacéutico, biotecnológico, materiales, energético, alimentario o medioambiental (CG1).
- Concebir, proyectar, calcular, y diseñar procesos, equipos, instalaciones industriales y servicios, en el ámbito de la ingeniería química y sectores industriales relacionados, en términos de calidad, seguridad, economía, uso racional y eficiente de los recursos naturales y conservación del medio ambiente (CG2).
- Dirigir y gestionar técnica y económicamente proyectos, instalaciones, plantas, empresas y centros tecnológicos en el ámbito de la ingeniería química y los sectores industriales relacionados (CG3).
- Realizar la investigación apropiada, emprender el diseño y dirigir el desarrollo de soluciones de ingeniería, en entornos nuevos o poco conocidos, relacionando creatividad, originalidad, innovación y transferencia de tecnología (CG4).
- Saber establecer modelos matemáticos y desarrollarlos mediante la informática apropiada, como base científica y tecnológica para el diseño de nuevos productos, procesos, sistemas y servicios, y para la optimización de otros ya desarrollados (CG5).
- Tener capacidad de análisis y síntesis para el progreso continuo de productos, procesos, sistemas y servicios utilizando criterios de seguridad, viabilidad económica, calidad y gestión medioambiental (CG6).
- Integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de emitir juicios y toma de decisiones, a partir de información incompleta o limitada, que incluyan reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas del ejercicio profesional (CG7).
- Liderar y definir equipos multidisciplinares capaces de resolver cambios técnicos y necesidades directivas en contextos nacionales e internacionales. (CG8).
- Adaptarse a los cambios, siendo capaz de aplicar tecnologías nuevas y avanzadas y otros progresos relevantes, con iniciativa y espíritu emprendedor (CG10).
- Poseer las habilidades del aprendizaje autónomo para mantener y mejorar las competencias propias de la ingeniería química que permitan el desarrollo continuo de la profesión (CG11).

### **2: Competencias Específicas**

- Aplicar conocimientos de matemáticas, física, química, biología y otras ciencias naturales, obtenidos mediante estudio, experiencia, y práctica, con razonamiento crítico para establecer soluciones viables económicamente a problemas técnicos (CE1).
- Diseñar productos, procesos, sistemas y servicios de la industria química, así como la optimización de otros ya desarrollados, tomando como base tecnológica las diversas áreas de la ingeniería química, comprensivas

de procesos y fenómenos de transporte, operaciones de separación e ingeniería de las reacciones químicas, nucleares, electroquímicas y bioquímicas (CE2).

- Conceptualizar modelos de ingeniería, aplicar métodos innovadores en la resolución de problemas y aplicaciones informáticas adecuadas, para el diseño, simulación, optimización y control de procesos y sistemas (CE3).
- Tener habilidad para solucionar problemas que son poco familiares, incompletamente definidos, y tienen especificaciones en competencia, considerando los posibles métodos de solución, incluidos los más innovadores, seleccionando el más apropiado, y poder corregir la puesta en práctica, evaluando las diferentes soluciones de diseño (CE4).
- Dirigir y supervisar todo tipo de instalaciones, procesos, sistemas y servicios de las diferentes áreas industriales relacionadas con la ingeniería química (CE5).
- Diseñar, construir e implementar métodos, procesos e instalaciones para la gestión integral de suministros y residuos, sólidos, líquidos y gaseosos, en las industrias, con capacidad de evaluación de sus impactos y de sus riesgos (CE6).
- Dirigir y gestionar la organización del trabajo y los recursos humanos aplicando criterios de seguridad industrial, gestión de la calidad, prevención de riesgos laborales, sostenibilidad, y gestión medioambiental (CE8).
- Gestionar la Investigación, Desarrollo e Innovación Tecnológica, atendiendo a la transferencia de tecnología y los derechos de propiedad y de patentes (CE9).
- Adaptarse a los cambios estructurales de la sociedad motivados por factores o fenómenos de índole económico, energético o natural, para resolver los problemas derivados y aportar soluciones tecnológicas con un elevado compromiso de sostenibilidad (CE10).
- Dirigir y realizar la verificación, el control de instalaciones, procesos y productos, así como certificaciones, auditorías, verificaciones, ensayos e informes (CE11).

### **Importancia de los resultados de aprendizaje que se obtienen en la asignatura:**

El seguimiento y superación de la asignatura tiene como finalidad completar la formación científica y técnica del estudiante, y fijar los conocimientos específicos del módulo de *Ingeniería de Procesos y Producto*, definido en Resolución de 8 de junio de 2009 de la Secretaría General de Universidades – BOE 4 agosto 2009-. En particular, sin descartar otros aspectos de interés en tal documento, se hace hincapié en lo que se dice de “Aplicar conocimientos de matemáticas, física, química, biología y otras ciencias naturales, obtenidos mediante estudio, experiencia, y práctica, con razonamiento crítico para establecer soluciones viables económicamente a problemas técnicos”. Así como en “Diseñar productos, procesos, sistemas y servicios de la industria química, así como la optimización de otros ya desarrollados, tomando como base tecnológica las diversas áreas de la ingeniería química, comprensivas de procesos y fenómenos de transporte, operaciones de separación e ingeniería de las reacciones químicas, nucleares, electroquímicas y bioquímicas”.

---

## **Evaluación**

---

### **Actividades de evaluación**

**El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación**

**1:**

**Opción 1:**

La evaluación es global y comprende:

1. Realización de presentaciones orales (P).
2. Resolución de casos prácticos y realización de trabajos académicos. Estos se convertirán en entregables,

en principio, uno por bloque, menos de aquel del que se realice la presentación oral. Además del contenido y del resultado esperado, se valorarán los razonamientos realizados y aspectos formales, así como la presentación puntual (**E**).

**3.** Observación directa sobre la participación activa en las clases (**O**).

La nota de la asignatura se calculará según la siguiente fórmula:

$$\text{Nota} = 0,3 \cdot \mathbf{P} + 0,6 \cdot \mathbf{E} + 0,1 \cdot \mathbf{O}$$

**2:**  
**Opción 2:**

Aquellos alumnos que no quieran seguir la evaluación según la opción 1, pueden optar por presentarse al examen de convocatoria (100% de la nota final).

## Actividades y recursos

### Presentación metodológica general

#### El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:

El proceso de aprendizaje se desarrollará en varios niveles: clases magistrales, resolución de problemas (casos), sesiones de trabajo práctico usando softwares específicos, práctica especial, presentaciones orales y entregables varios, siendo creciente el nivel de participación del estudiante. En las clases magistrales se darán las bases teóricas que conforman la asignatura y resolverán algunos problemas modelo. Las clases de problemas y casos y las sesiones de trabajo práctico y práctica especial son el complemento eficaz de las clases magistrales, ya que permitirán verificar la compresión de la materia, a la vez que contribuirán a desarrollar en el alumno un punto de vista más aplicado y crítico. Los entregables constituirán la parte más importante de la evaluación en la que el estudiante establecerá los pilares de su éxito académico.

### Actividades de aprendizaje programadas (Se incluye programa)

#### El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades...

- 1:** Clases magistrales (15 h) donde se impartirá la teoría de los distintos temas propuestos.
- 2:** Clases presenciales de resolución de problemas y casos (10 h). En estas clases se resolverán problemas por parte del profesor y del alumno supervisado por el profesor. Los problemas o casos estarán relacionados con la parte teórica explicada en las clases magistrales.
- 3:** Sesiones de trabajo práctico (3 h) en las que realizar búsquedas avanzadas y resolver problemas complejos mediante el uso de herramientas informáticas. Estas sesiones culminarán cada uno de los temas y/o bloques. Se iniciarán de la mano del profesor de modo que el ejercicio correspondiente será concluido por el alumno (de forma individual o en grupos de 2-3 personas, según la dificultad, extensión del trabajo, disponibilidad de medios, etc.). Estas sesiones, en la mayoría de los casos, exigirán un entregable para ser corregido y evaluado por el profesor.
- 4:** Prácticas especiales (2 h) correspondientes a una sesión de visita a empresa, charla de expertos, seminario temático, debate con la opción de presencia de un experto externo, etc.
- 5:** Estudio individual (24 h no presenciales). Se recomienda al alumno que realice el estudio individual de forma continuada a lo largo del semestre.

**6:** Las sesiones prácticas anteriores así como las exposiciones individuales requerirán de otras 11 h no presenciales para concluir un entregable (un ejercicio resuelto, la exposición, etc.) por cada uno de los bloques temáticos. La actividad anterior y esta serán vasos comunicantes, dependiendo del tema o bloque.

**7:** Tutela personalizada profesor-alumno (7 h presenciales).

**8:** Evaluación (3 h). Habrá exposiciones individuales de los alumnos sobre temas propuestos por el profesor relacionados con los bloques de contenidos, tendrán una duración de hasta 15 minutos.

## Planificación y calendario

### Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

Las clases magistrales y de resolución problemas se imparten según horario establecido por la EINA además cada profesor informará de su horario de atención de tutorías. El temario previsto para la asignatura es el siguiente:

#### BLOQUE 1.- INTRODUCCIÓN

1. Materiales nanoestructurados.

#### BLOQUE 2.- SÓLIDOS POROSOS

2. Materiales amorfos, zeolitas y afines, MOFs.

3. Visualización de estructuras cristalinas.

#### BLOQUE 3.- MATERIALES CARBONOSOS

4. Carbones activos y materiales grafíticos.

5. Nanotubos de carbono, grafeno y derivados.

#### BLOQUE 4.- NANOPARTÍCULAS Y COMPUESTOS

6. Materiales nanoparticulados.

7. Compuestos y nanocompuestos.

8. Nanotoxicidad.

## Bibliografía

- Cragg, P.J., *A practical guide to supramolecular chemistry*, Ed. John Wiley & Sons, Singapore (2005).
- Cussler, E.L., G.D. Moggridge, *Chemical product design*, Ed. Cambridge University Press, Cambridge (2001).
- Fahlman, B.D. *Materials chemistry*, Ed. Springer, New York (2011).
- *Handbook of zeolite science and technology*, S.M. Auerbach, K.A. Carrado, P.K. Dutta (eds.), Ed. Marcell Dekker, New York (2003).
- *Nanostructured materials and nanotechnology*, H.S. Nalwa (ed). Ed. Academic Press, San Diego (2002).
- Rankin, D.W.H., N.W. Mitzel, C.A. Morrison, *Structural methods in molecular inorganic chemistry*, Ed. John Wiley & Sons, Chichester (2013).
- Smart, L., E. Moore, *Química del estado sólido*, Ed. Addison-Wesley Iberiaamericana, Wilmington (1995).
- Xu, R., W. Pang, J. Yu, Q. Huo, J. Chen, *Chemistry of zeolites and related porous materials. Synthesis and structure*, Ed. John Wiley & Sons, Singapore (2007).

## Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada