

Guia docent

230865 - MSD - Ciència de Materials en Fàrmacs

Última modificació: 24/05/2024

Unitat responsable: Escola Tècnica Superior d'Enginyeria de Telecomunicació de Barcelona
Unitat que imparteix: 748 - FIS - Departament de Física.

Titulació: MÀSTER UNIVERSITARI EN FÍSICA PER A L'ENGINYERIA (Pla 2018). (Assignatura optativa).
MÀSTER UNIVERSITARI ERASMUS MUNDUS EN BIO & PHARMACEUTICAL MATERIALS SCIENCE (Pla 2021).
(Assignatura obligatòria).

Curs: 2024 **Crèdits ECTS:** 4.0 **Idiomes:** Anglès

PROFESSORAT

Professorat responsable: POL MARCEL LLOVERAS MUNTANE

Altres: Segon quadrimestre:
POL MARCEL LLOVERAS MUNTANE - 21, 23
MICHELA ROMANINI - 21, 23
JOSE LUIS TAMARIT MUR - 21, 23

CAPACITATS PRÈVIES

Coneixements en termodinàmica fonamental i física de l'estat sòlid.

REQUISITS

Cap

COMPETÈNCIES DE LA TITULACIÓ A LES QUALS CONTRIBUEIX L'ASSIGNATURA

Bàsiques:

CB7. Que els estudiants sàpiguin aplicar els coneixements adquirits i la seva capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relatius al seu camp d'estudi.

CB8. Que els estudiants siguin capaços d'integrar coneixements i enfrontar-se a la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, inclogui reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judici.

CB9. Que els estudiants sàpiguin comunicar les seves conclusions i els coneixements i raons últimes que les sustenten a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats.

CB10. Que els estudiants posseeixen les habilitats d'aprenentatge que els permetin continuar estudiant d'una manera que haurà de ser en gran mesura autodirigida o autònoma.

METODOLOGIES DOCENTS

L'assignatura s'imparteix en 3 classes expositives setmanals de 2 hores en grup gran, combinant teoria i exercicis, i dues sessions pràctiques de laboratori en grup petit.

OBJECTIUS D'APRENTATGE DE L'ASSIGNATURA

Un cop superada l'assignatura, els estudiants seran capaços de determinar les propietats cristal·logràfiques de diferents polimorfs, les condicions d'equilibri per una fase o coexistència de fases, dibuixar diagrames de fase polimòrfics o binaris, i distingir entre diferents estats d'equilibri, metaestables i inestables, i la seva rellevància per la formulació de medicaments.

HORES TOTALS DE DEDICACIÓ DE L'ESTUDIANTAT

Tipus	Hores	Percentatge
Hores aprenentatge autònom	64,0	64.00
Hores grup gran	30,0	30.00
Hores grup petit	6,0	6.00

Dedicació total: 100 h

CONTINGUTS

Conceptes bàsics de cristal·lografia

Descripció:

Ordre translacional, cel·la unitat, xarxa de Bravais. Grups puntuals, grups d'espai, sistemes cristal·lins. Plans cristal·logràfics, xarxa recíproca, índexs de Miller. Del sistema cristal·lí a la estructura i geometria mol·lecular: cristalls amb una base i cristalls mol·leculars. Càlcul de patrons de difracció a partir de factors atòmics i d'estructura. Polimorfisme a l'estat sòlid de medicaments i altres mol·lècules orgàniques. Generació del segon harmònic.

Objectius específics:

L'estudiant aprendrà a distingir i caracteritzar les diferents fases estructurals en base a les seves simetries i les relacions entre elles.

Activitats vinculades:

Classes expositives de teoria i resolució d'exercicis

Dedicació: 24h

Grup gran/Teoria: 8h

Aprenentatge autònom: 16h

Equilibri de fases i transicions de fase

Descripció:

Potencials termodinàmics per sistemes hidrostàtics pVT. Relacions de Maxwell. Equacions TdS. Condicions generals d'equilibri. Fluctuacions. Principi de Le Châtelier.

Objectius específics:

L'estudiant adquirirà els fonaments termodinàmics bàsics necessaris per poder comprendre conceptes més avançats i específics en temes posteriors.

Activitats vinculades:

Classes expositives de teoria i resolució d'exercicis

Dedicació: 18h

Grup gran/Teoria: 6h

Aprenentatge autònom: 12h

Transicions de fase i diagrama de fases topològic temperatura-pressió

Descripció:

Condicions d'equilibri per sistemes hidrostàtics pVT. Transicions de fase de primer ordre. Equació de Clausius-Clapeyron. Dominis d'estabilitat i metaestabilitat. Transicions de fase d'ordre superior. Transicions de fase grup-subgrup. Punts crítics i triples. Diagrames de fase T-p topològics. Tècniques de calorimetria.

Objectius específics:

L'estudiant aprofundirà en les transicions de fase de primer ordre i la noció d'estabilitat relativa, i aprendrà a construir diagrames de fase topològics. L'estudiant adquirirà la capacitat experimental per caracteritzar una transició de fase i el diagrama de fases temperatura-pressió.

Activitats vinculades:

Classes expositives de teoria i resolució d'exercicis

Pràctica 1: caracterització de transicions de fase i el diagrama de fases temperatura-pressió mitjançant calorimetria.

Dedicació: 21h

Grup gran/Teoria: 6h

Grup mitjà/Pràctiques: 3h

Aprenentatge autònom: 12h

Teoria de Landau per transicions de fase

Descripció:

Teoria de Landau. Paràmetre d'ordre. Transicions de fase ferroiques. Interaccions anisotròpiques de llarg abast. Auto-acomodació. Transicions de fase estructurals. Classificació mecànica i cinètica de les transicions de fase.

Objectius específics:

L'estudiant s'introduirà en la teoria de Landau per les transicions de fase, i com es pot utilitzar per comprendre l'origen de les textures microestructurals i els dominis, originant els cicles d'histeresi i altres fenòmens.

Activitats vinculades:

Classes expositives de teoria i resolució d'exercicis

Dedicació: 17h

Grup gran/Teoria: 5h

Aprenentatge autònom: 12h

Fases fora de l'equilibri

Descripció:

Estat vítri i transicions vítries. Dinàmica i relació estructural en l'estat vítri. Dependència en pressió de la temperatura de transició vítria. Fases de no equilibri i mesofases de medicaments. Espectroscopia dielèctrica.

Objectius específics:

L'estudiant aprendrà el concepte d'estat vítri i transició vítria i les seves característiques, i tècniques experimentals per caracteritzar-los.

Activitats vinculades:

Pràctica 2: Caracterització de la dinàmica de relaxació i de la transició vítria mitjançant espectroscopia dielèctrica i calorimetria.

Dedicació: 11h

Grup gran/Teoria: 2h

Grup mitjà/Pràctiques: 3h

Aprenentatge autònom: 6h



Sistemes binaris

Descripció:

Termodinàmica de mescles, potencial químic. Tipus de diagrames de fase binaris: eutèctic, metatèctic i peritèctic. Solubilitat i miscibilitat. Estats metaestables i inestables. Nucleació vs. descomposició espinodal.

Objectius específics:

L'estudiant aprendrà els conceptes relacionats amb la termodinàmica dels sistemes binaris.

Activitats vinculades:

Classes expositives de teoria i resolució d'exercicis

Dedicació: 9h

Grup gran/Teoria: 3h

Aprenentatge autònom: 6h

SISTEMA DE QUALIFICACIÓ

Problemes resolts de manera autònoma referents al Tema 1: 20%

Problemes resolts de manera autònoma referents als Temes 2-3: 25%

Problemes resolts de manera autònoma referents al Tema 4: 15%

Problemes resolts de manera autònoma referents al Tema 6: 10%

Informes de les pràctiques de laboratori 30%

No es realitzaran proves de reavaluació.

NORMES PER A LA REALITZACIÓ DE LES PROVES.

La resolució dels problemes s'haurà de dur a terme individualment.

Els informes de laboratori es realitzaran en grup.

BIBLIOGRAFIA

Bàsica:

- Giacobazzo, C ... [et al.]. Fundamentals of Crystallography. Bath (Gran Bretanya): Oxford University Press, 1995. ISBN 0198555792.
- Cuevas-Diarte, Miquel Àngel; Oonk, Harry A. J.. Molecular mixed crystals [en línia]. Switzerland: Springer, 2021 [Consulta: 19/10/2021]. Disponible a: <https://ebookcentral.proquest.com/lib/upcatalunya-ebooks/detail.action?docID=6629023>. ISBN 9783030687274.
- Papon, P.; Leblond, J; Meijer, P.H.E. Physique des transitions de phases : concepts et applications : cours avec exercices corrigés. 2e éd. Paris: Dunod, 2002. ISBN 2100065513.
- Descamps, M. Disordered pharmaceutical materials [en línia]. Lille (France): Wiley-VCH, 2016 [Consulta: 19/10/2021]. Disponible a: <https://onlinelibrary-wiley-com/doi/book/10.1002/9783527652693>. ISBN 9783527652693.
- Ashcroft, N.W.; Mermin, N. D.; Wei, D. Solid state physics. Singapore: Cengage Learning, 2016. ISBN 9789814369893.

Complementària:

- Saleh, B.E. A; Teich, M.C. Fundamentals of photonics. 3rd ed. Hoboken: John Wiley & Sons, 2019. ISBN 9781119506874.

RECURSOS

Altres recursos:

Informació sobre cristal·lografia:

<https://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/csd-core/components/csd/> /><https://www.cryst.ehu.es/>