



Guía docente

230865 - MSD - Ciencia de Materiales en Fármacos

Última modificación: 24/05/2024

Unidad responsable: Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Telecomunicación de Barcelona

Unidad que imparte: 748 - FIS - Departamento de Física.

Titulación: MÁSTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA PARA LA INGENIERÍA (Plan 2018). (Asignatura optativa).
MÁSTER UNIVERSITARIO ERASMUS MUNDUS EN BIO & PHARMACEUTICAL MATERIALS SCIENCE (Plan 2021). (Asignatura obligatoria).

Curso: 2024

Créditos ECTS: 4.0

Idiomas: Inglés

PROFESORADO

Profesorado responsable: POL MARCEL LLOVERAS MUNTANE

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

CAPACIDADES PREVIAS

Conocimientos en termodinámica fundamental y física del estado sólido.

REQUISITOS

Ninguna.

COMPETENCIAS DE LA TITULACIÓN A LAS QUE CONTRIBUYE LA ASIGNATURA

Básicas:

CB7. Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

CB8. Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicio.

CB9. Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

CB10. Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

METODOLOGÍAS DOCENTES

La asignatura se imparte en 3 clases expositivas semanales de 2 horas en grupo grande, combinando teoría y ejercicios, y dos sesiones de prácticas de laboratorio en grupo.

OBJETIVOS DE APRENDIZAJE DE LA ASIGNATURA

Una vez superada la asignatura, los estudiantes serán capaces de determinar las propiedades cristalográficas de diferentes polimorfos, las condiciones de equilibrio para una fase o coexistencia de fases, dibujar diagramas de fase polimórficos o binarios, y distinguir entre diferentes estados de equilibrio, metaestables e inestables, i su relevancia para la formulación de medicamentos.

HORAS TOTALES DE DEDICACIÓN DEL ESTUDIANTE

Tipo	Horas	Porcentaje
Horas grupo grande	30,0	30.00
Horas aprendizaje autónomo	64,0	64.00
Horas grupo pequeño	6,0	6.00

Dedicación total: 100 h

CONTENIDOS

Conceptos básicos de cristalografía

Descripción:

Orden translacional, celda unidad, red de Bravais. Grupos puntuales, grupos de espacio, sistemas cristalinos. Planos cristalográficos, red recíproca, índices de Miller. Del sistema cristalino a la estructura y geometría molecular: cristales con una base y cristales moleculares. 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.

Objetivos específicos:

El estudiante aprenderá a distinguir y caracterizar las distintas fases estructurales en base a sus simetrías y las relaciones entre ellas.

Actividades vinculadas:

Clases expositivas de teoría y resolución de ejercicios

Dedicación: 24h

Grupo grande/Teoría: 8h

Aprendizaje autónomo: 16h

Equilibrio de fases y transiciones de fase

Descripción:

Potenciales termodinámicos para sistemas hidrostáticos pVT. Relaciones de Maxwell. Ecuaciones TdS. Condiciones generales de equilibrio. Fluctuaciones. Principio de Le Châtelier.

Objetivos específicos:

El estudiante adquirirá los fundamentos termodinámicos básicos necesarios para poder comprender conceptos más avanzados y específicos en temas posteriores.

Actividades vinculadas:

Clases expositivas de teoría y resolución de ejercicios

Dedicación: 18h

Grupo grande/Teoría: 6h

Aprendizaje autónomo: 12h

Transiciones de fase y diagrama de fases topológico temperatura-presión

Descripción:

Condiciones de equilibrio para sistemas hidrostáticos pVT. Transiciones de fase de primer orden. Ecuación de Clausius-Clapeyron. Dominios de estabilidad y metaestabilidad. Transiciones de fase de orden superior. Transiciones de fase grupo-subgrupo. Puntos críticos y triples. Diagramas de fase T-p topológicos. Técnicas de calorimetría.

Objetivos específicos:

El estudiante profundizará en las transiciones de fase de primer orden y la noción de estabilidad relativa y aprenderá a construir diagramas de fase topológicos. El estudiante adquirirá la capacidad experimental para caracterizar una transición de fase y el diagrama de fases temperatura-presión.

Actividades vinculadas:

Clases expositivas de teoría y resolución de ejercicios

Práctica 1: caracterización de transiciones de fase y el diagrama de fases temperatura-presión mediante calorimetría.

Dedicación: 21h

Grupo grande/Teoría: 6h

Grupo mediano/Prácticas: 3h

Aprendizaje autónomo: 12h

Teoría de Landau para transiciones de fase

Descripción:

Teoría de Landau. Parámetro de orden. Transiciones de fase ferroicas. Interacciones anisotrópicas de largo alcance. Auto-acomodación. Transiciones de fase estructurales. Clasificación mecanística y cinética de las transiciones de fase.

Objetivos específicos:

El estudiante se introducirá en la teoría de Landau para transiciones de fase, y como se puede utilizar para comprender el origen de las texturas microestructurales y los dominios, originando los ciclos de histéresis y otros fenómenos.

Actividades vinculadas:

Clases expositivas de teoría y resolución de ejercicios

Dedicación: 17h

Grupo grande/Teoría: 5h

Aprendizaje autónomo: 12h

Fases fuera del equilibrio

Descripción:

Estado vítreo y transiciones vítreas. Dinámica y relación estructural en el estado vítreo. Dependencia en presión de la temperatura de transición vítrea. Fases de no equilibrio y mesofases de medicamentos. Espectroscopía dieléctrica.

Objetivos específicos:

El estudiante aprenderá el concepto de estado vítreo y transición vítrea y sus características, y técnicas experimentales para caracterizarlos.

Actividades vinculadas:

Práctica 2: Caracterización de la dinámica de relajación y de la transición vítrea mediante espectroscopía dieléctrica y calorimetría.

Dedicación: 11h

Grupo grande/Teoría: 2h

Grupo mediano/Prácticas: 3h

Aprendizaje autónomo: 6h



Sistemas binarios

Descripción:

Termodinámica de mezclas, potencial químico. Tipos de diagramas de fase binarios: eutéctico, metatéctico y peritéctico. Solubilidad y miscibilidad. Estados metaestables e inestables. Nucleación vs. descomposición espinodal.

Objetivos específicos:

El estudiante aprenderá los conceptos relacionados con la termodinámica de los sistemas binarios.

Actividades vinculadas:

Clases expositivas de teoría y resolución de ejercicios

Dedicación: 9h

Grupo grande/Teoría: 3h

Aprendizaje autónomo: 6h

SISTEMA DE CALIFICACIÓN

Problemas resueltos de manera autónoma referentes al Tema 1: 20%

Problemas resueltos de manera autónoma referentes al Tema 2-3: 25%

Problemas resueltos de manera autónoma referentes al Tema 4: 15%

Problemas resueltos de manera autónoma referentes al Tema 6: 10%

Informes de las prácticas de laboratorio 30%

No se realizarán pruebas de reevaluación.

NORMAS PARA LA REALIZACIÓN DE LAS PRUEBAS.

La resolución de los problemas se tendrá que llevar a cabo individualmente.

Los informes de laboratorio se realizarán en grupo.

BIBLIOGRAFÍA

Básica:

- Giacobozzo, 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 línea]. 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 línea]. 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.

Complementaria:

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

RECURSOS

Otros recursos:

Información sobre cristalografía:

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