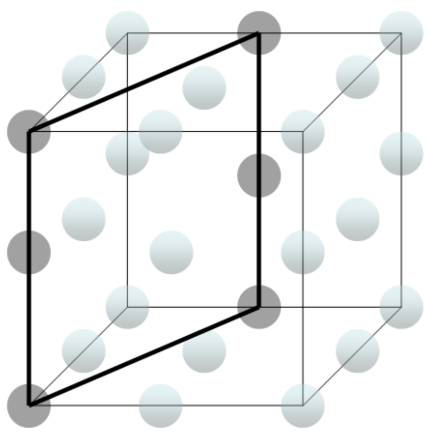
Problemas cortos

1. La velocidad de crecimiento de las caras de un cristal depende de la densidad superficial de átomos sobre esa cara, que es función de la orientación de la cara. Calcular el número de átomos por m^2 (densidad atómica superficial) en las caras (120) de la estructura del NaCl. Radios iónicos: $r_{Na} = 0.102 \cdot 10^{-9}$ m, $r_{Cl} = 0.181 \cdot 10^{-9}$ m. Masas atómicas: $Mw_{Na} = 22.99$ uma, $Mw_{Cl} = 35.45$ uma.

- 1.25×10^{19} átomos/m^2
- 2.792×10^{18} átomos/m^2
- $5.58 \cdot 10^{18}$ átomos/m^2
- 1.117×10^{19} átomos/m^2
- 2.234×10^{19} átomos/m^2
- ninguna de las anteriores; valor correcto:

Sol: en la celda unidad del cloruro sódico (p. 327) los planos (120) contienen $4 \cdot \frac{1}{4} + 2 \cdot \frac{1}{2} = 2$ **átomos**

y el área es $Area = \left[(2 \cdot r_{Na} + 2 \cdot r_{Cl})^2\right] \cdot \sqrt{1^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2}$ **(ver figura). Por tanto:**



$$N_{atomos} = 2$$

$$\rho_{sup} = \frac{N_{atomos}}{Area}$$

$$\rho_{sup} = 5.58 \times 10^{18} \text{ átomos/m}^2$$

2. Una suspensión de caolín en agua (barbotina) tiene una viscosidad dependiente de la velocidad de deformación. La dependencia está dada por:

$$\eta(\gamma_{mod}) = 430 \cdot \frac{1}{(1 + 0.3\gamma_{mod})^{0.65}}.$$

donde η es la viscosidad de la suspensión en Pa.s y γ es la velocidad de deformación (módulo del tensor gradiente de velocidad simetrizado $\gamma_{mod} \equiv \left|\nabla v + \nabla v^T\right|$) en s^{-1}. En una operación de conformado, esta suspensión fluye a través de un conducto en el que el campo de velocidad está dado por:

$$v_1(x_1, x_2, x_3) = -\varepsilon \cdot x_1 \qquad \text{con} \qquad \varepsilon = 9.6 \qquad s^{-1}$$

$$v_2(x_1, x_2, x_3) = 0$$

$$v_3(x_1, x_2, x_3) = \varepsilon \cdot x_3$$

(flujo elongacional plano). Calcular la viscosidad de la barbotina cuando circula por el conducto.

- 33 Pa.s
- 124 Pa.s
- 0.89 Pa.s
- 20.2 Pa.s
- 576 Pa.s
- ninguna de las anteriores; valor correcto:

Sol: (ver examen de febrero 2004 y TC_01_01.pdf)

$$\nabla v = \begin{pmatrix} -\varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix} \qquad \gamma = \nabla v + \nabla v^T \qquad \gamma = \begin{pmatrix} -19.2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 19.2 \end{pmatrix}$$

$$\gamma_{mod} = \sqrt{\frac{1}{2}\left[\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\left(\gamma_{i,j}\right)^2\right]} \qquad \gamma_{mod} = 19.2$$

Y por tanto la viscosidad de la barbotina es: $\eta(\gamma_{mod}) = 124$ Pa.s

---

3. Un material compuesto conductor está formado por láminas alternadas de tres materiales diferentes, cada uno de ellos homogéneo e isótropo. Los espesores de las láminas son L_1, L_2 y L_3, las densidades másicas son ρm_1, ρm_2 y ρm_3 y las conductividades eléctricas son σ_1, σ_2 y σ_3 espectivamente. Deducir la expresión que da la resistividad eléctrica del material compuesto ρ_c cuando se establece una corriente eléctrica perpendicular a las láminas

- $\rho_c = \dfrac{X_1}{\sigma_1 \cdot \rho m_1} + \dfrac{X_2}{\sigma_2 \cdot \rho m_2} + \dfrac{X_3}{\sigma_3 \cdot \rho m_3}; \quad X_i \equiv L_i \Big/ \sum_{i=1}^{3} L_i$
- $\rho_c = \dfrac{X_1}{\sigma_1} + \dfrac{X_2}{\sigma_2} + \dfrac{X_3}{\sigma_3}; \quad X_i \equiv L_i \Big/ \sum_{i=1}^{3} L_i$

- $\rho_c = X_1 \rho m_1 \sigma_1 + X_2 \rho m_2 \sigma_2 + X_3 \rho m_3 \sigma_3; \quad X_i \equiv L_i \Big/ \sum_{i=1}^{3} L_i$

- $\rho_c = \dfrac{X_1}{\sigma_1} + \dfrac{X_2}{\sigma_2} + \dfrac{X_3}{\sigma_3}; \quad X_i \equiv L_i \Big/ \sum_{i=1}^{3} L_i$

- $\dfrac{1}{\rho_c} = X_1 \sigma_1 + X_2 \sigma_2 + X_3 \sigma_3; \quad X_i \equiv L_i \Big/ \sum_{i=1}^{3} L_i$

- ninguna de las anteriores; respuesta correcta:

Sol.: en condiciones de isoflujo (eléctrico), la densidad de corriente que atraviesa las láminas es igual para todas ellas e igual a la que atraviesa el compuesto. Aplicando la ley de Ohm macroscópica al compuesto y a cada lámina e igualando las densidades de corriente eléctrica:

$$J_c = \frac{\Delta V_c}{\rho_c (L_1 + L_2 + L_3)} = \frac{\Delta V_1}{L_1} \sigma_1 = \frac{\Delta V_2}{L_2} \sigma_2 = \frac{\Delta V_3}{L_3} \sigma_3$$

de donde: $\Delta V_1 = \dfrac{J_c L_1}{\sigma_1}; \quad \Delta V_2 = \dfrac{J_c L_2}{\sigma_2}; \quad \Delta V_1 = \dfrac{J_c L_3}{\sigma_3}; \quad \Delta V_c = \rho_c J_c \sum_{i=1}^{3} L_i$

La caída de potencial total a través del compuesto debe ser igual a la suma de las caídas de potencial a través de las tres láminas y por tanto:

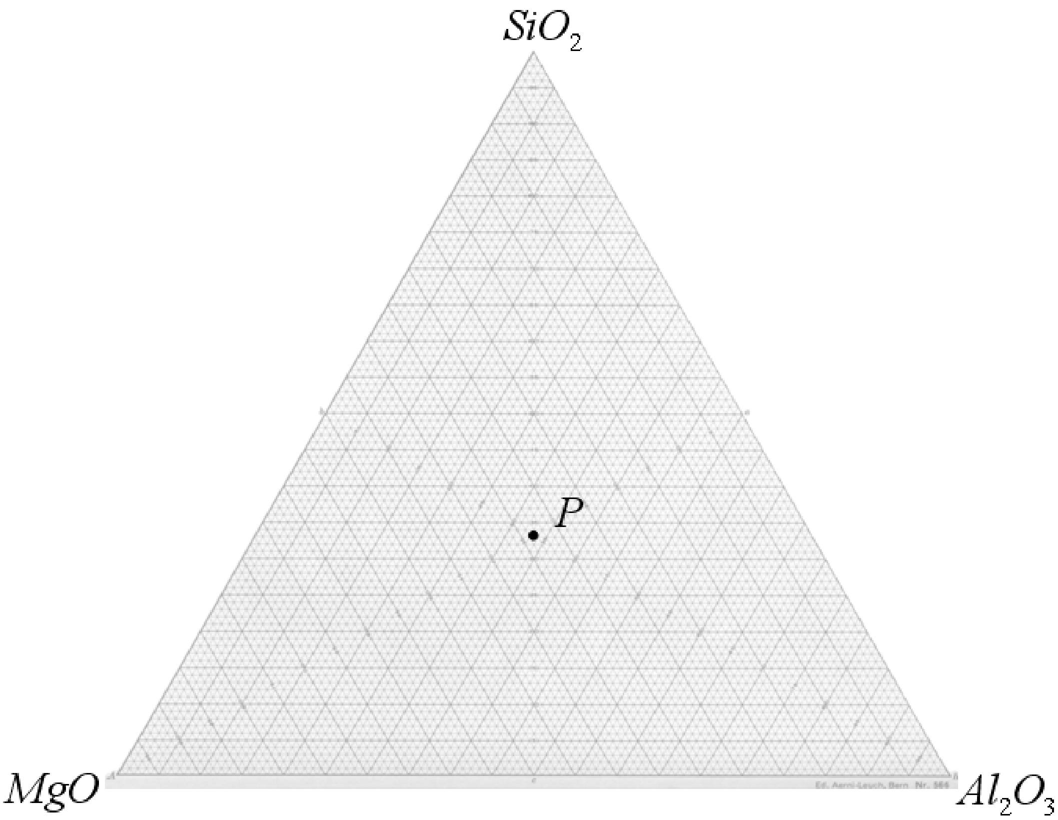
$$\rho_c \sum_{i=1}^{3} L_i = \frac{L_1}{\sigma_1} + \frac{L_2}{\sigma_2} + \frac{L_3}{\sigma_3} \quad \Rightarrow \quad \rho_c = \frac{X_1}{\sigma_1} + \frac{X_2}{\sigma_2} + \frac{X_3}{\sigma_3} \quad \text{donde} \quad X_i \equiv \frac{L_i}{\sum_{i=1}^{3} L_i}$$

Un modo aún más directo es considerar que las resistencias de las tres láminas están en serie, y por tanto deben sumarse. Las resistencias son proporcionales a los espesores de cada lámina e inversamente proporcionalmente a las conductividades.

---

4. Calcular la composición en fracciones másicas (X_i) de Si, O, Mg y Al del punto P que se encuentra en el centro del diagrama triangular que se adjunta. El diagrama triangular está en base molar. Usar las masas atómicas de la tabla de la pág. 543.

- X_{Si}=0.139, X_O=0.474, X_{Mg}=0.120, X_{Al} = diferencia a 1
- X_{Si}=0.145, X_O=0.244, X_{Mg}=0.450, X_{Al} = diferencia a 1
- X_{Si}=0.289, X_O=0.098, X_{Mg}=0.231, X_{Al} = diferencia a 1
- X_{Si}=0.087, X_O=0.512, X_{Mg}=0.208, X_{Al} = diferencia a 1
- ninguna de las anteriores; respuesta correcta:



Sol.: las masas atómicas son:

$Mw_{Si} = 28.09$ $Mw_O = 16.00$ $Mw_{Mg} = 24.31$ $Mw_{Al} = 26.98$

La composición molar del punto en el centro del diagrama es de 1/3 para cada componente, es decir:

$x_{SiO2} = \frac{1}{3}$ $x_{Al2O3} = \frac{1}{3}$ $x_{MgO} = \frac{1}{3}$

Tomando como base de cálculo 1 kmol de P, de cada elemento hay los siguientes kg

Silicio:	$m_{Si} = x_{SiO2} \cdot 1 \cdot Mw_{Si}$	$m_{Si} = 9.363$
Oxígeno	$m_O = x_{SiO2} \cdot 2 \cdot Mw_O + x_{Al2O3} \cdot 3 \cdot Mw_O + x_{MgO} \cdot 1 Mw_O$	$m_O = 32$
Magnesio	$m_{Mg} = x_{MgO} \cdot 1 Mw_{Mg}$	$m_{Mg} = 8.103$
Aluminio	$m_{Al} = x_{Al2O3} \cdot 2 Mw_{Al}$	$m_{Al} = 17.987$
La masa total es:	$m_{tot} = m_{Si} + m_O + m_{Mg} + m_{Al}$	$m_{tot} = 67.453$

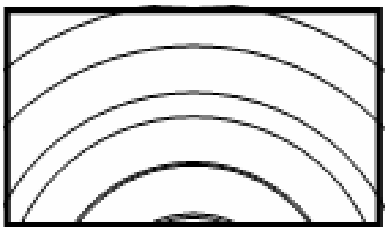
Y las fracciones másicas son por tanto:

$X_{Si} = \frac{m_{Si}}{m_{tot}}$ $X_O = \frac{m_O}{m_{tot}}$ $X_{Mg} = \frac{m_{Mg}}{m_{tot}}$ $X_{Al} = \frac{m_{Al}}{m_{tot}}$

$X_{Si} = 0.139$ $X_O = 0.474$ $X_{Mg} = 0.12$ $X_{Al} = 0.267$

$X_{Si} + X_O + X_{Mg} + X_{Al} = 1$

5. Determinar la clase cristalográfica para un listón de madera con sección transversal como la que se muestra en la figura:



- Monoclínico $2/m$.
- Ortorrómbico $m\,m\,2$.
- Ortorrómbico $m\,m\,m$.
- Hexagonal $6/m$.
- Hexagonal $6/m\,m\,m$.
- Ninguna de las respuestas anteriores. Respuesta correcta:

Sol.: Ortorrómbico $m\,m\,m$

6. Un material compuesto P está constituido por láminas alternadas de tres materiales distintos A, B, C; el grosor de las láminas de C es el doble de las de B. Si el módulo elástico del compuesto en la dirección paralela a las láminas es de $E_P = 701.9$ GPa, calcular la proporción en masa de A con respecto a la de C (kgA/kgC) en P. Densidades: $\rho_A = 1490$ kg/m^3; $\rho_C = 3150$ kg/m^3. Módulos elásticos: $E_A = 1050$ GPa; $E_B = 453$ GPa; $E_C = 387$ GPa.

- 0.307
- 0.597
- 1.262
- 1.543
- 3.262
- Ninguna de las respuestas anteriores. El valor correcto es:

Solución: en condiciones de isodeformación (dirección paralela a las láminas), el módulo elástico se calcula según la regla de mezcla de Voigt:

$$E_P = V_A E_A + V_B E_B + V_C E_C$$

Como las láminas tienen la misma sección, y el grosor de las láminas de C es el doble de las de B, también la fracción volumétrica de C será el doble de la de B. Y como la suma de las fracciones volumétricas es uno:

$$V_C = 2V_B \qquad 1 = V_A + V_B + V_C = V_A + 3V_B$$

$$E_P = V_A E_A + V_B E_B + V_C E_C = (1 - 3V_B) E_A + V_B E_B + 2V_B E_C$$

De donde se puede despejar la fracción volumétrica en B:

$$V_B = \frac{E_P - E_A}{E_B + 2E_C - 3E_A} \qquad V_B = \frac{E_P - E_A}{E_B + 2E_C - 3E_A} \qquad V_B = 0.181$$

Y las fracciones de A y C serán:

$$V_A = 1 - 3V_B \qquad V_C = 2V_B \qquad V_A = 0.457 \qquad V_C = 0.362$$

Luego la relación entre las masas de A y C será:

$$\frac{\rho_A \cdot V_A}{\rho_C \cdot V_C} = 0.597$$

---

7. Un determinado material con propiedades piezoeléctricas y piroeléctricas, y cuya simetría pertenece al sistema tetragonal, presenta, entre otros, los siguientes módulos piezoeléctricos: $d_{311} = 3.5$, $d_{113} = 6.1$ ¿Cuánto valdrá el módulo d_{223}?

- -6.1
- -3.5
- 0.0
- 3.5
- 6.1
- Ninguna de las respuestas anteriores. Respuesta correcta:

Sol.: Como es un material piroeléctrico, tiene que pertenecer a una clase polar, bien la 4 o la 4mm. En notación de Voigt, conocemos los módulos d_{31} y d_{15}, y nos piden el módulo d_{24}. Para ambas clases, se cumple que $d_{24} = d_{15}$, luego $d_{223} = d_{113} = 6.1$

---

8. El nylon 6 puede presentar dos formas cristalinas, conocidas como formas α y γ, en las cuales el eje cristalográfico c está alineado en la dirección de las cadenas y es perpendicular a los ejes a y b. Para la forma α, el parámetro c mide 17.24 Å, que corresponde a dos unidades químicas repetitivas en una conformación completamente extendida; el área definida por los ejes a y b es de 70.75 Å2. Para la forma γ, las cadenas se encuentran en una conformación cuasi extendida en las que se produce un acortamiento de 0.18 Å por cada grupo amida; el área definida por los ejes a y b es de 38.23 Å. Si la celdilla de la forma α contiene el doble de cadenas que la celdilla de la forma γ, ¿cuál es la relación de densidades (densidad forma α / densidad forma γ) entre ambas formas?

- 0.529
- 0.936
- 0.948
- 1.058

- 1.069
- Ninguna de las respuestas anteriores. Respuesta correcta:

Sol: Si la celdilla de la forma contiene el doble de cadenas (el doble de masa) que la celdilla de la forma γ, la relación de densidades será igual a la inversa de la relación de volúmenes, donde se considere una celda doble para la forma γ:

$$\frac{\rho_\alpha}{\rho_\gamma} = \frac{2V_\gamma}{V_\alpha} = \frac{2A_{ab}^{(\gamma)}c^{(\gamma)}}{A_{ab}^{(\alpha)}c^{(\alpha)}}$$

Si el parámetro c corresponde a dos unidades químicas repetitivas, que contienen dos grupos amida, el acortamiento del parámetro c para la forma γ será:

$$c^{(\gamma)} = c^{(\alpha)} - 2\cdot 0.18 = 17.24 - 0.36 = 16.88$$

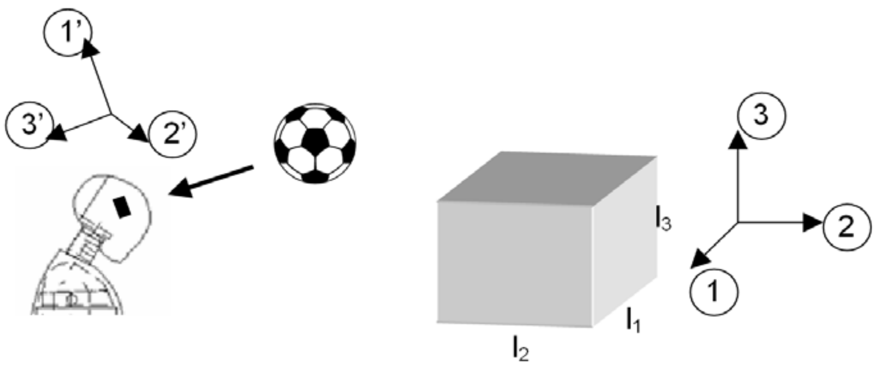
Sustituyendo, se tiene:

$$\frac{\rho_\alpha}{\rho_\gamma} = \frac{2V_\gamma}{V_\alpha} = \frac{2A_{ab}^{(\gamma)}c^{(\gamma)}}{A_{ab}^{(\alpha)}c^{(\alpha)}} = \frac{2\cdot 16.88\cdot 38.23}{17.24\cdot 70.75} = 1.058$$

$$\frac{\rho_\alpha}{\rho_\gamma} = 1.058$$

Problema 1

Se desea estudiar si los jugadores de fútbol pueden sufrir lesiones a largo plazo como consecuencia de cabecear el balón. Para ello, se realizan ensayos haciendo impactar un balón de reglamento sobre un "dummy", tal y como se representa en el esquema:



La cabeza del "dummy" contiene un acelerómetro constituido por un paralelepípedo de material piezoeléctrico (ZnO) colocado de manera que el eje 3 (en la orientación convencional) coincide con la dirección 3' en la cual tiene lugar el impacto.

1. Expresar las componentes del vector polarización del piezoeléctrico en función de la aceleración (suponer que la aceleración únicamente tiene componente no nula en la dirección 3) (30% de la nota de este problema).
2. En uno de los ensayos, se miden los siguientes valores de polarización (en $C.m^2$) en función del tiempo (en s). Calcular los valores de la aceleración a(t) para cada par de valores del tiempo y de la polarización que aparecen en las siguientes tablas (30% de la nota de este problema):

tiempo$_i$=	Polarización$_i$=
0	0
$2 \cdot 10^{-3}$	$4.43 \cdot 10^{-7}$
$4 \cdot 10^{-3}$	$3.65 \cdot 10^{-8}$
$6 \cdot 10^{-3}$	$6.89 \cdot 10^{-10}$
$8 \cdot 10^{-3}$	$9.86 \cdot 10^{-8}$
$10 \cdot 10^{-3}$	$7.45 \cdot 10^{-8}$

3. Un factor que se usa en la práctica para estimar la probabilidad de que se produzca una lesión es el HIC (Head Injury Criteria), que se define como:

$$\mathrm{HIC} = (t_1 - t_0) \cdot \left[\frac{1}{9.8 \cdot (t_1 - t_0)} \cdot \int_{t_0}^{t_1} a(t)\, dt \right]^{2.5}$$

donde $a(t)$ es la aceleración en cada instante t (en ms^{-2}), y t_0 y t_1 son los tiempos inicial y final en segundos. Calcular el factor HIC para el ensayo del apartado anterior (40% de la nota de este problema).

Datos: Estructura del ZnO: Hexagonal, clase $6mm$. Densidad del ZnO: $\rho_{ZnO} = 5605$ kg/m^3. Dimensiones del piezoeléctrico: $l_1 = 0.003$ m; $l_2 = 0.005$ m; $l_3 = 0.002$ m; módulos piezoeléctricos del ZnO: $d_{31} = -5.12 \cdot 10^{-12}$ C/N, $d_{33} = 12.3 \cdot 10^{-12}$ C/N; $d_{15} = -8.3 \cdot 10^{-12}$ C/N.

Sol.: La resolución de este problema es análoga a la del 08_06_02.
1) Como la aceleración únicamente tiene componente no nula en la dirección 3, a_3, la única componente del tensor de esfuerzos a considerar es el elemento t_{33} o t_3 en notación de Voigt. Para la clase hexagonal 6mm, las correspondencias entre los módulos piezoeléctricos son: $d_{31} = d_{32}$; d_{33}; $d_{15} = d_{24}$. Aplicando la ecuación del efecto piezoeléctrico y considerando que el tensor de esfuerzos sólo tiene componente no nula t_3, se obtienen las siguientes componentes para el vector de polarización:

$$P_1 = 0 \qquad P_2 = 0 \qquad P_3 = d_{33}\tau_3$$

Y expresando el tensor de esfuerzos en función de la aceleración, se obtiene:

$$P_3 = d_{33}\tau_3 = d_{33}\frac{F_3}{l_1 l_2} = d_{33}\frac{Ma_3}{l_1 l_2} = d_{33}\frac{l_1 l_2 l_3 \rho a_3}{l_1 l_2} = d_{33} l_3 \rho a_3$$

2) Tanto para la polarización como para la aceleración, únicamente la componente 3 es no nula. Reordenando la expresión del apartado 1), se obtiene la aceleración en función de la polarización:

$$a_3 = \frac{P_3}{d_{33} l_3 \rho}$$

lo que permite calcular las aceleraciones:

$$a_3 = \frac{\text{Polarización}}{d_{33} \cdot l_3 \cdot \rho_{ZnO}} \qquad \text{acel} = a_3 \qquad \text{acel} = \begin{pmatrix} 0.0 \\ 3212.9 \\ 264.7 \\ 5.0 \\ 715.1 \\ 540.3 \end{pmatrix} \text{m/s}^2$$

Puesto que la aceleración se conoce en forma tabular, en el cálculo del factor HIC se calcula la integral numéricamente, p.ej. con la fórmula del trapecio:

$$I = \int_{t_0}^{t_1} a(t)dt \qquad \Delta t = \text{tiempo}_2 - \text{tiempo}_1 \qquad \Delta t = 2 \times 10^{-3} \text{ s}$$

$$I = \frac{1}{2} \cdot \Delta t \cdot \left[\text{acel}_1 + 2 \left(\sum_{i=2}^{5} \text{acel}_i \right) + \text{acel}_6 \right] \qquad I = 8.94$$

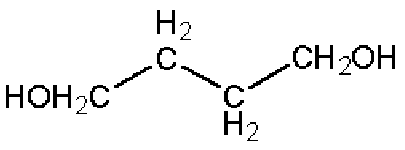
Sustituyendo en la expresión dada en el enunciado, el valor para HIC que se obtiene es de:

$$HIC = \left(10 \cdot 10^{-3} - 0\right) \cdot \left[\frac{1}{9.8 \cdot \left(10 \cdot 10^{-3} - 0\right)} \cdot I \right]^{2.5} \qquad HIC = 794$$

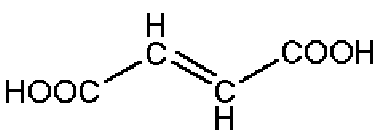
Problema 2

Una vía de dos etapas para la fabricación de un poliéster reticulado se basa en llevar a cabo:

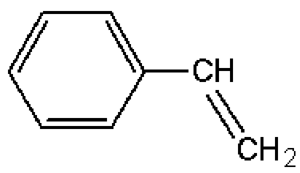
- en la primera etapa, la polimerización entre el butilenglicol (A) y el ácido fumárico (B) para dar un poliéster insaturado P1.
- en la segunda etapa, la reticulación del poliéster insaturado resultante P1 por medio de estireno (D) para dar el producto final P (poliéster reticulado).



A



B



D

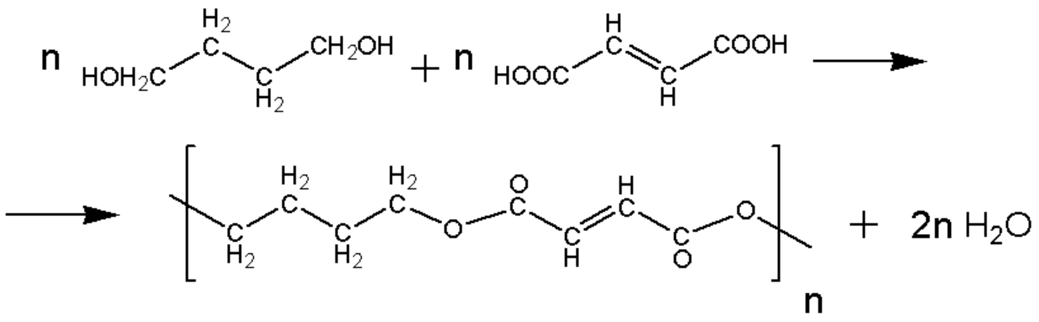
En la producción se parte de A, B y D como materias primas y se hacen las siguientes especificaciones:

- producción de P1 en la primera etapa con una relación molar de A a B estequiométrica.
- en la segunda etapa, la cantidad de D es también la estequiométrica para reticular el polímero P1 haciendo reaccionar todos sus dobles enlaces.

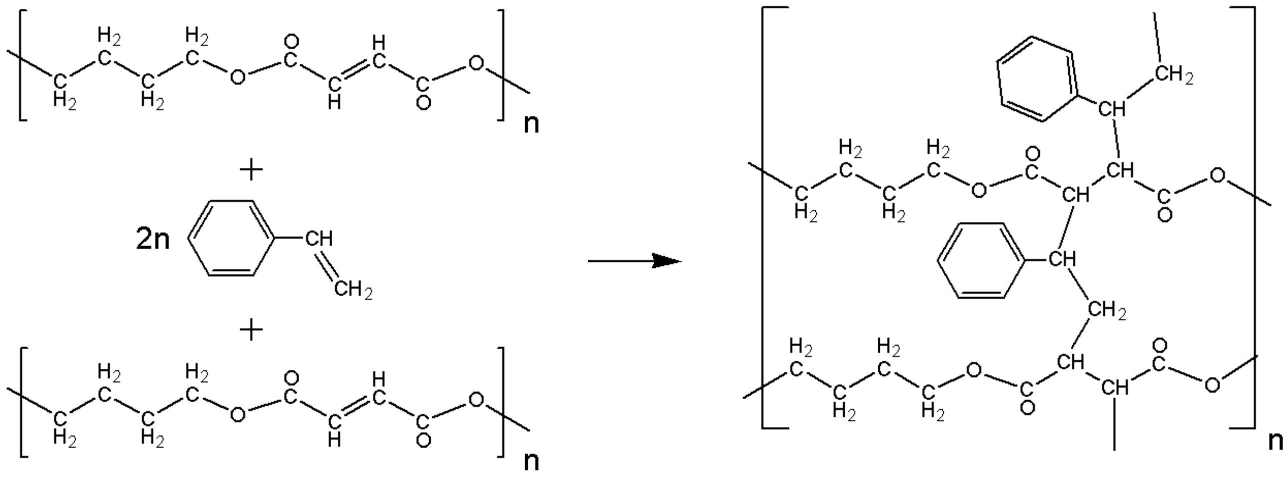
- todos los reactivos se consumen totalmente en las dos etapas (grado de conversión del 100% para todos los reactivos).

1. Escribir la fórmula química del poliéster insaturado P1 (10% de la nota de este problema).
2. Escribir la fórmula química del poliéster reticulado P (10% de la nota de este problema).
3. Determinar las cantidades (en kg) de A, B y D que se requieren para obtener $m_{tot} = 1$ kg de poliéster reticulado P (40% de la nota de este problema).
4. Determinar las cantidades (en kg) de subproductos de bajo peso molecular que se produzcan en la polimerización (1ª etapa), o en la reticulación (2ª etapa) o en ambas, referidas igualmente a 1 kg de poliéster reticulado P (40% de la nota de este problema).

Sol.: la reacción de la primera etapa para dar P1 es (pág. 210):



y la reticulación con estireno para dar P es (pág. 210):



P1 P

Las masas moleculares de las especies atómicas, de l os reactivos y de la unidad estructural repetitiva (UER) de P son:

$$Mw_O = 16.0 \qquad Mw_C = 12.01 \qquad Mw_H = 1.0$$

$Mw_A = 4Mw_C + 2Mw_O + 10Mw_H$ $\qquad Mw_A = 90.04$ kg/kmol

$Mw_B = 4Mw_C + 4Mw_O + 4Mw_H$ $\qquad Mw_B = 116.04$ kg/kmol

$Mw_D = 8Mw_C + 8Mw_H$ $\qquad Mw_D = 104.08$ kg/kmol

$Mw_{UER} = 32Mw_C + 8Mw_O + 36Mw_H$ $\qquad Mw_{UER} = 548.32$ kg/kmol

$Mw_{H2O} = Mw_O + 2Mw_H$ $\qquad Mw_{H2O} = 18$ kg/kmol

Por tanto, $m_P = 1$ kg de P contiene $N_{UER} = \dfrac{m_P}{Mw_{UER}}$, $N_{UER} = 1.824 \times 10^{-3}$ kmol de UER. Para sintetizar esta cantidad de P y a la vista de la estequiometría de las reacciones de síntesis, serán por tanto necesarias las siguientes cantidades (en kg) de reactivos:

$m_A = 2N_{UER} \cdot Mw_A$ $\qquad m_A = 0.328$ kg

$m_B = 2N_{UER} \cdot Mw_B$ $\qquad m_B = 0.423$ kg

$m_D = 2N_{UER} \cdot Mw_D$ $\qquad m_D = 0.38$ kg

y se producen $m_{H2O} = 4N_{UER} \cdot Mw_{H2O}$, es decir $m_{H2O} = 0.131$ kg de agua como subproducto de la policondensación (1ª etapa). Como comprobación, el balance total de masas es:

Reactivos: $m_A + m_B + m_D = 1.1313$ kg

Productos $m_P + m_{H2O} = 1.1313$ kg

También es posible trabajar con una UER que es la mitad de la unidad estructural del polímero reticulado de la figura anterior, lo que equivale a dividir todos los coeficientes estequiométricos entre 2, y conduce a los mismo resultados.

Sin embargo, la estructura que aparece en la parte inferior derecha de la pág. 210 no es la UER ni un múltiplo de la misma (p or eso no aparece entre corchetes) y es incorrecto usarla como UER y como base de cálculo. Es solamente un fragmento del retículo polimérico que ilustra cómo se reticulan (entrelazan covalentemente) las cadenas lineales.