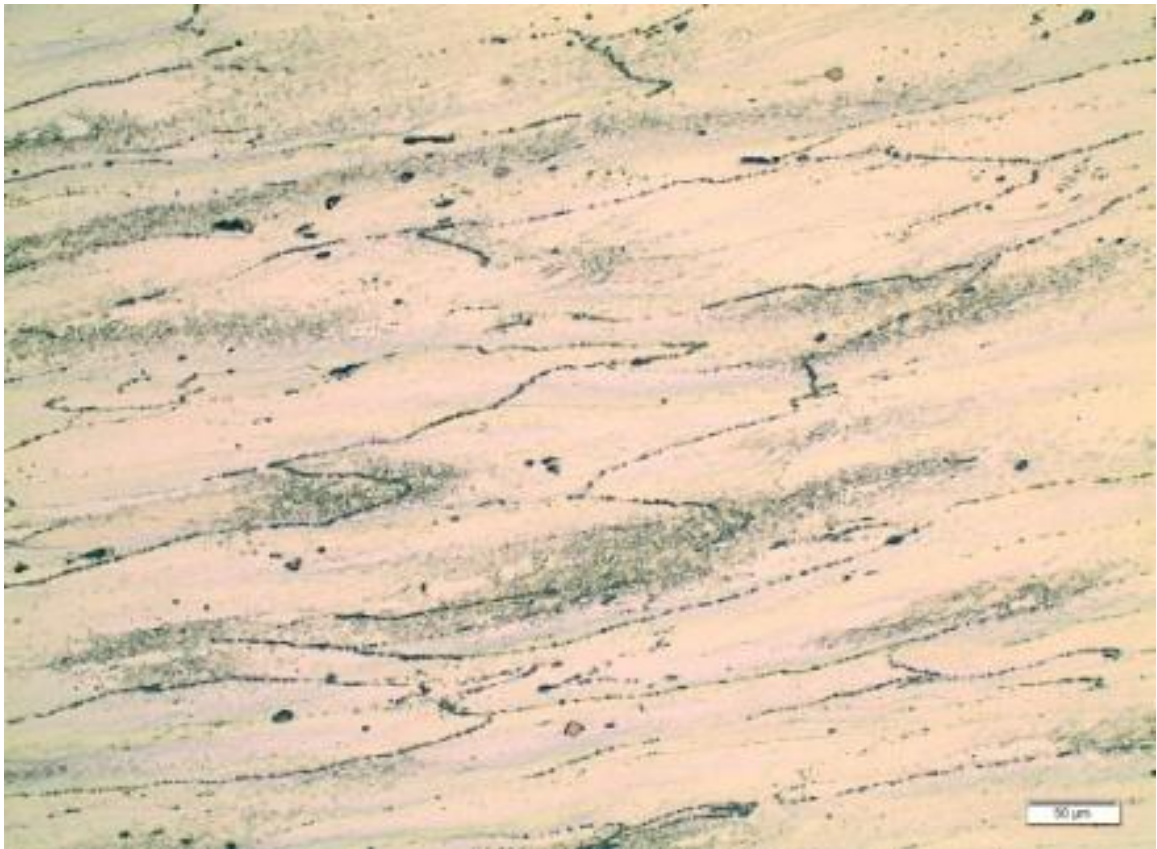
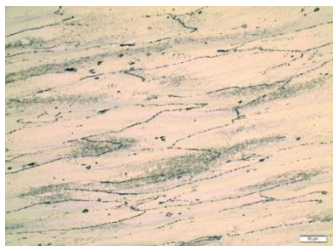


# Material-ES

REVISTA DE LA SOCIEDAD ESPAÑOLA DE MATERIALES





### *Imagen de Portada:*

Micrografía de una superaleación con alto contenido en cromo y níquel torsionada a  $4s^{-1}$ , 950°C.

**“Optimización del conformado de una superaleación experimental”.**

*J. Llana. A. Cerpa. M. Carsí*

### **Editor**

Rodrigo Moreno. *Instituto de Cerámica y Vidrio, CSIC. Madrid. España.*

### **Secretaría**

Anna Muesmann. *SOCIEMAT. Madrid. España.*

### **Junta Directiva de SOCIEMAT**

#### **Presidente:**

Juan José de Damborenea González

#### **Vicepresidente:**

Rodrigo Moreno Botella

#### **Secretaria:**

Gloria Patricia Rodríguez Donoso

#### **Tesorera:**

Anna M<sup>a</sup> Muesmann Torres

#### **Presidente Saliente:**

Paloma Fernández Sánchez

#### **Vocales:**

M<sup>a</sup> Victoria Biezma Moraleda

Jose Ygnacio Pastor Caño

M<sup>a</sup> Teresa Pérez Prado

José Luis Plaza Canga-Argüelles

Daniel Sola Martínez

---

URL: <http://sociemat.es>

Correo electrónico: [info@sociemat.es](mailto:info@sociemat.es) / [sociemat1996@gmail.com](mailto:sociemat1996@gmail.com)

Tel.: 618 170 493

Sociedad Española de Materiales SOCIEMAT

Entidad inscrita en el R<sup>o</sup> Nacional de Asociaciones del

Ministerio del Interior, Grupo 1, Sección 1, Número Nacional 161428

### ÍNDICE

#### ARTÍCULOS

|                                                                                                                                                         |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>Modelización molecular de la adsorción de proteínas y surfactantes iónicos sobre nanotubos de carbono</b><br>I. LadoTourriño; A. Cerpa Naranjo ..... | 33 |
| <b>Optimización del conformado de una superaleación experimental</b><br>J. Llana; A. Cerpa; M. Carsí .....                                              | 37 |
| <b>Trends on ICT in materials science education</b><br>F. Lloret; J. Piñero .....                                                                       | 41 |
| <b>Kinetic study of an AA7075 alloy under T6 heat treatment</b><br>B. J. M. Freitas; D. Silva .....                                                     | 44 |

#### I+D+i EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA DE MATERIALES

|                                                                                                                                 |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>Nace CYTES, el grupo especializado en ciencia y tecnologías de superficies</b><br>A. Palmero; J. Santiso; J.M. Albella ..... | 48 |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|

### ***EDITORIAL***

Nuevamente llegamos a la fecha de nuestro Congreso Nacional de Materiales, que en la presente edición de 2018 se celebra en Salamanca, cuya prestigiosa Universidad celebra nada menos que su 800 aniversario. Como siempre, esperamos que el Congreso sea un rotundo éxito, toda vez que esta edición se celebra por primera vez de forma conjunta con la Sociedad Portuguesa de Materiales, lo que sin duda enriquecerá el contenido científico y permitirá estrechar los lazos entre los centros y Universidades de ambos países.

Por cuanto respecta a nuestra revista, una vez más os instamos a enviarnos vuestros trabajos, y esperamos que la celebración del congreso sea un aliciente para volver a actualizar los temas de trabajo y fomentar la participación de todos los sectores.

En este número, además, presentamos algunas novedades. Por una parte, la revista Material-ES se abre a una mayor audiencia con la publicación de trabajos en inglés, lo que esperamos redunde en una mayor difusión y alcance de los artículos publicados y a la publicación de un trabajo enviado por colegas de la prestigiosa Universidad de São Carlos de Brasil. Deseamos que este sea el inicio de una mayor proyección de nuestra revista en el exterior. Por otra parte, iniciamos un nuevo apartado de la revista, que hemos titulado “I+D+i EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA DE MATERIALES”, en el que presentaremos las actividades científico-tecnológicas de los distintos grupos de trabajo en ciencia y tecnología de materiales de nuestro país. Desde ya os animamos a enviarnos aportaciones para este nuevo apartado que nos permitan dar a conocer la actividad que se desarrolla en vuestros grupos de trabajo y os agradecemos nuevamente el apoyo prestado hasta ahora y el que esperamos nos prestéis en el futuro.

## MODELIZACIÓN MOLECULAR DE LA ADSORCIÓN DE PROTEÍNAS Y SURFACTANTES IÓNICOS SOBRE NANOTUBOS DE CARBONO

*I. LadoTourinho<sup>1</sup>; A. Cerpa Naranjo*

Universidad Europea de Madrid, c) Tajo s/n, Villaviciosa de Odón, 28670 Madrid

[<sup>1</sup>misabel.lado@universidadeuropea.es](mailto:misabel.lado@universidadeuropea.es)

**Resumen:** En este trabajo se estudian las interacciones que se establecen entre distintas moléculas de interés en aplicaciones biomédicas, en concreto la albúmina de suero fetal bovino (BSA) y los surfactantes dodecil sulfato de sodio (SDS) y dodecil bencen sulfonato de sodio (SDBS), con un nanotubo de carbono (CNT) mediante métodos computacionales de dinámica molecular. La adsorción de las dichas moléculas sobre la superficie del CNT se analiza siguiendo la evolución temporal de las distancias intermoleculares, así como calculando la energía de interacción molécula-CNT.

**Palabras Clave:** Nanotubos de carbono, albúmina de suero fetal bovino (BSA), dodecil sulfato de sodio (SDS), dodecil bencen sulfonato de sodio (SDBS), dinámica molecular.

### 1. INTRODUCCIÓN

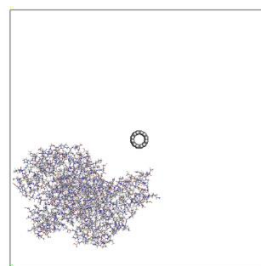
En los últimos años, los nanotubos de carbono (CNTs) se han aplicado cada vez más en los campos de la biomedicina y la farmacia [1, 2]. Sin embargo, puesto que se trata de una tecnología reciente, no se sabe todavía mucho acerca de la toxicidad, complicaciones o reacciones adversas que puedan causar en el organismo [3, 4] tras su interacción con las estructuras moleculares del medio biológico. Otro de los inconvenientes de estas nanoestructuras es que son muy hidrófobas, y su manipulación en la mayor parte de los disolventes de interés biológico no es sencilla. Para solucionar este problema es necesario recurrir a técnicas de funcionalización de los CNTs, bien mediante la formación de enlaces covalentes [5], bien mediante interacciones no covalentes, como pueden ser las que se establecen cuando se utilizan surfactantes para su dispersión [6]. El objetivo del presente trabajo es lograr un mayor conocimiento de los mecanismos de interacción entre los CNTs y: 1. La proteína de transporte del suero fetal bovino (BSA) y 2. Los surfactantes iónicos SDS y SDBS, utilizando técnicas computacionales de dinámica molecular. Se espera que, los resultados obtenidos de este estudio computacional permitan avanzar en el conocimiento de los mecanismos de interacción que se establecen entre los CNTs y las moléculas existentes en los medios biológicos.

### 2. MÉTODO COMPUTACIONAL

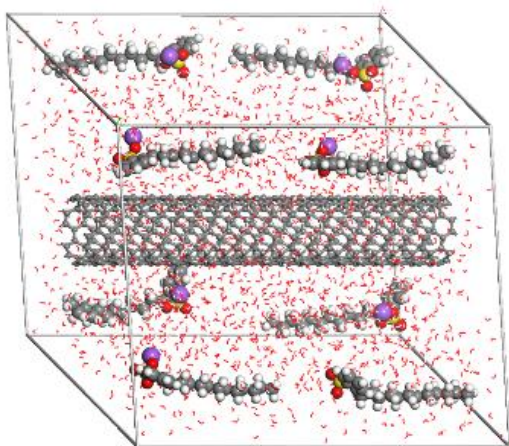
El estudio de la interacción se llevó a cabo utilizando un método computacional de dinámica molecular, que permite analizar la evolución temporal de un sistema mediante la integración de las ecuaciones de movimiento de Newton. En concreto, se utilizó el módulo Forcite del software Materials Studio [7].

El sistema se modelizó en el ensemble NVT, a una temperatura constante de 37°C y durante un tiempo de simulación de 1000 ps para la BSA y de 1500 ps para ambos surfactantes (SDS y SDBS). Los modelos utilizados se muestran en las figuras 1 y 2 respectivamente. En el caso de la BSA se construyó una celda de dimensiones 150x150x150 Å<sup>3</sup> en cuyo centro se posicionó un CNT (6, 6) y una de las cadenas de BSA a una distancia inicial de 15 Å a la superficie del CNT. Se trabajó sólo con una de las cadenas, debido al alto coste computacional de estas simulaciones. Se utilizaron dos tipos de CNTs distintos, sin funcionalizar y funcionalizados con grupos carboxílicos, para estudiar la influencia de la polaridad del CNT en su interacción con la proteína.

Para simular el comportamiento de los surfactantes se construyó una celda de dimensiones 40x40x49 Å<sup>3</sup> con un CNT (6, 6) ocupando la posición central y 1, 2, 4 o 8 moléculas de surfactante situadas inicialmente en las esquinas de la celda y a distancias medias de 12 Å hasta la superficie del CNT. Además, se añadió al modelo un determinado número de moléculas de agua para simular sistemas más realistas. El modelo utilizado para el caso de 8 moléculas de SDBS se muestra en la figura 2.



**Figura 1.** Modelo utilizado en la simulación de la interacción CNT-BSA.

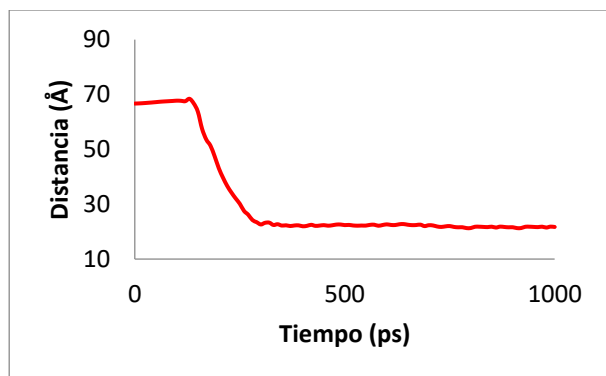


**Figura 2.** Modelo utilizado en la simulación de la interacción CNT-8 moléculas de SDBS.

### 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

#### 3.1 Interacción CNT-BSA

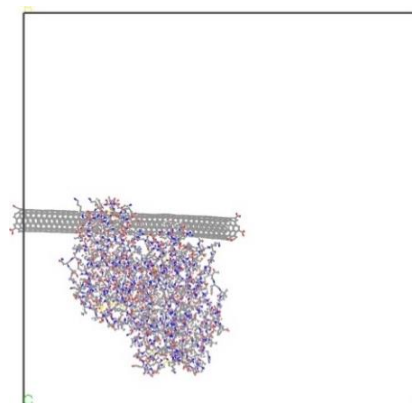
En la figura 3 se muestra la variación de la distancia entre los centros de masas de la BSA y del CNT sin funcionalizar con el tiempo de simulación. Para el CNT funcionalizado se obtuvo una gráfica similar.



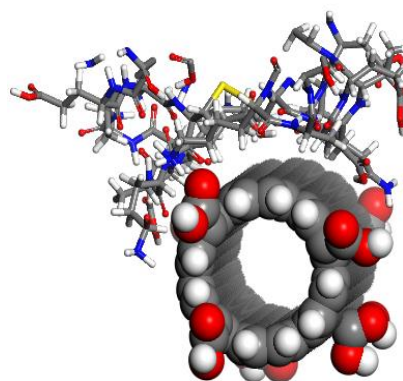
**Figura 3.** Variación de la distancia CNT-BSA con el tiempo de simulación.

Esta figura indica que existe atracción entre el CNT y la proteína, de modo que, al cabo de aproximadamente 300 ps de simulación se alcanza una situación de equilibrio, en la cual la BSA se posiciona cerca de la superficie del CNT e interacciona fuertemente con él, manteniéndose estable en dicha posición durante el resto de la simulación. La estructura final, así como un detalle de la zona de interacción CNT-BSA, se muestran en la figura 4.

La interacción atractiva entre la BSA y el CNT también se puede confirmar calculando la energía de absorción de la proteína sobre el CNT en función del tiempo de simulación ( $E_{\text{absorción}} = E(\text{CNT} + \text{BSA}) - E_{\text{CNT}} - E_{\text{BSA}}$ ). El resultado se muestra en la figura 5.

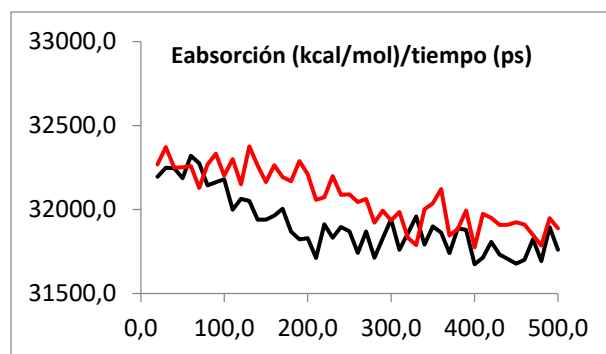


a)



b)

**Figura 4.** Estructura final tras 1000 ps de simulación del sistema CNT-BSA (a). Detalle de la zona de interacción entre la BSA y el CNT (b).



**Figura 5.** Energía de absorción del sistema CNT-BSA con el tiempo de simulación: — CNT sin funcionalizar, — CNT funcionalizado.

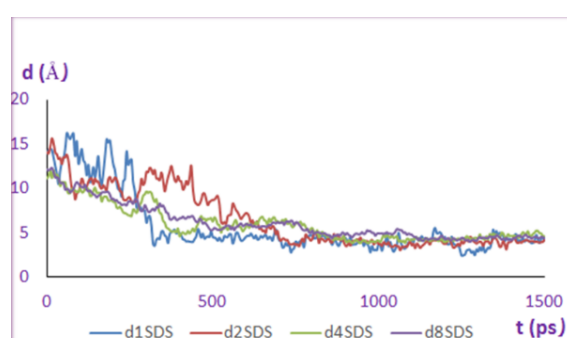
La disminución de la energía con el tiempo indica que las estructuras finales, en las cuales ha habido un acercamiento entre el CNT y la proteína, son más estables que las iniciales, confirmando por tanto la interacción favorable que se establece entre ambas moléculas.



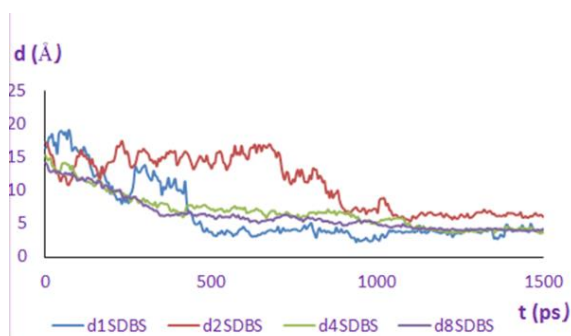
Además, la curva del CNT funcionalizado, de menor energía, demuestra que la atracción entre la proteína y este tipo de CNT es mayor, lo cual indica una mayor interacción cuando el CNT ve aumentada su polaridad mediante la introducción de los grupos ácidos.

### 3.2 Interacción CNT-surfactantes (SDS y SDBS)

Al igual que en el caso del sistema BSA-CNT, ambos surfactantes interactúan con el CNT y van acercándose a su superficie a medida que transcurre el tiempo de simulación. La variación de la distancia media surfactante-superficie del CNT se muestra en la figura 6 para el SDS y en la 7 para el SDBS.



**Figura 6.** Variación de la distancia media entre 1, 2, 4 y 8 moléculas de SDS y la superficie del CNT.



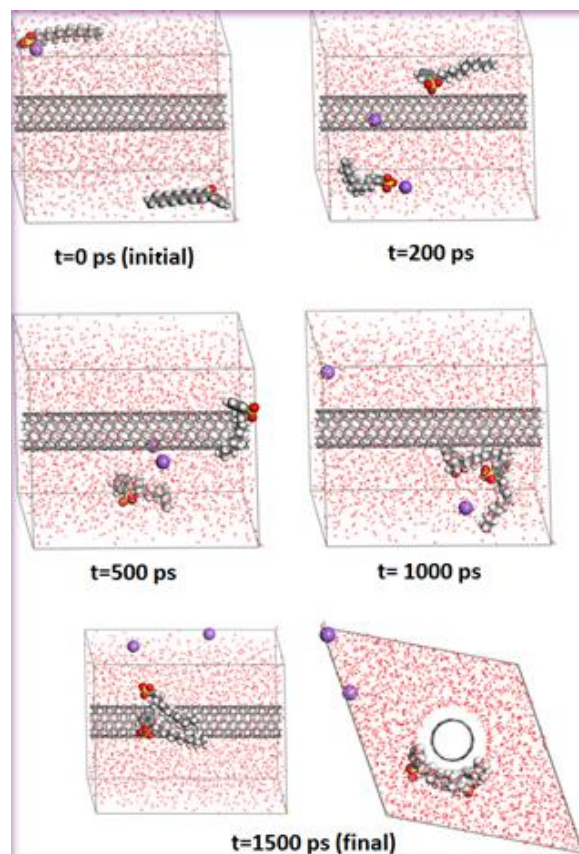
**Figura 7.** Variación de la distancia media entre 1, 2, 4 y 8 moléculas de SDBS y la superficie del CNT.

La evolución temporal de la posición de las moléculas de surfactante y su estabilización en posiciones cercanas a la superficie del CNT se muestra en la figura 8 para el caso del sistema conteniendo 2 moléculas de SDBS. El resto de los sistemas presentan comportamientos similares.

Las diferencias entre la energía potencial de los estados final e inicial de todos los sistemas se muestran en la tabla 1. La contribución a la energía potencial de la energía de no enlace, que es la principal responsable de la interacción surfactante-CNT, también se indica en la última columna de esta tabla.

Los valores negativos de las diferencias de energía indican

que los estados finales de estos sistemas, en los cuales las moléculas de surfactante se encuentran en las proximidades de la superficie del CNT e interactuando fuertemente con él, son más estables que los estados iniciales, en los cuales debido a la gran distancia entre los surfactantes y el CNT, la interacción es prácticamente nula.



**Figura 8.** Variación de la posición de 2 moléculas de SDBS y acercamiento al CNT durante el proceso de simulación.

**Tabla 1:** Diferencias entre la energía potencial y la energía de no enlace entre los estados final e inicial de la simulación.

| Sistema | $\Delta E_{\text{potencial}}$<br>(kcal/mol) | $\Delta E_{\text{noenlace}}$<br>(kcal/mol) |
|---------|---------------------------------------------|--------------------------------------------|
| SDS1    | -457,85                                     | -113,81                                    |
| SDS2    | -550,40                                     | -103,43                                    |
| SDS4    | -730,41                                     | -112,85                                    |
| SDS8    | -1182,56                                    | -228,55                                    |
| SDBS1   | -438,64                                     | -87,32                                     |
| SDBS2   | -497,38                                     | -31,87                                     |
| SDBS4   | -675,75                                     | -44,87                                     |
| SDBS8   | -1147,76                                    | -191,00                                    |

#### 4. CONCLUSIONES

Los resultados de los cálculos computacionales de dinámica molecular indican que, cuando un CNT se sitúa en las proximidades de la proteína de transporte ABS, o de los surfactantes iónicos SDS y SDBS, surge una interacción favorable que provoca el acercamiento entre estas moléculas y el CNT. Tanto la proteína como ambos surfactantes se sitúan a una distancia de equilibrio que se mantiene constante después de un determinado tiempo de simulación. La variación con el tiempo de las energías del sistema también confirma dicha interacción. Todas las estructuras finales presentan una energía menor que las estructuras iniciales.

Para poder utilizar los CNTs en aplicaciones biomédicas, es vital comprender sus mecanismos de interacción con los medios biológicos. La aplicación de técnicas computacionales es uno de los medios para lograr una mayor comprensión de dichos mecanismos, y por lo tanto de los efectos que los CNTs pueden causar en su interacción con los organismos vivos.

#### 5. AGRADECIMIENTOS

Las autoras desean agradecer el apoyo económico para la realización de este trabajo al proyecto CTQ2013-47699-R, concedido por el MINECO, así como al proyecto 2014/UEM2014, concedido por la Universidad Europea de Madrid.

#### 6. REFERENCIAS

- [1] Li, L., Lin, R., He, H., Jiang, L., Gao M., Spectrochim. Acta, Part A, 2013, 105, 45–51.
- [2] Knyazev, A., Louise, L., Veber, M., Langevin, D., Filoramo, A., Prina-Mello, A., Campidelli, S., Chem. Eur. J. 2011, 17, 14663 – 14671.
- [3] Smart, SK., Cassady AI., Lu GQ., Martin DJ., Carbon, 2006, 4, 1034-1047.
- [4] Tian F, Cui D, Schwarz H, Estrada GG, Kobayashi H, Toxicology in Vitro, 2006, 20, 1202-1212.
- [5] Hirsch A., Angew. Chem. Int. Ed. 2002, 11, 1853-1859.
- [6] Wang H., Zhou W., Ho DL., Winey Ki., Fischer JE., Glinka CJ., Hobbie EK., Nano Lett., 2004, 4, 1789-1793.
- [7] Materials Studio, (2018). Retrieved from <http://accelrys.com>



## OPTIMIZACIÓN DEL CONFORMADO DE UNA SUPERALEACIÓN EXPERIMENTAL

*Jaime Llanea Fernández<sup>1</sup>. Arisbel Cerpa Naranjo<sup>2</sup>. Manuel Carsi<sup>3</sup>*<sup>1</sup>Alumno del Máster Universitario en Ingeniería Industrial, Universidad Europea de Madrid<sup>2</sup>Departamento de Ingeniería Industrial y Aeroespacial. Escuela de Arquitectura, Ingeniería y Diseño.  
Universidad Europea de Madrid<sup>3</sup>Departamento de Metalurgia Física CENIM-CSIC, Madrid. [carsi@cenim.csic.es](mailto:carsi@cenim.csic.es)

**Resumen:** En el presente trabajo se estudian los parámetros de conformado de una superaleación con alto contenido en cromo y níquel introduciendo un 0.9% de Ti e incrementando el C hasta 0,2% en masa. El material resultante presenta una microestructura de granos equiaxiales de unas 300  $\mu\text{m}$ . Después de diferentes tratamientos termomecánicos simulados con ensayos de torsión se observa un afino de grano con tamaños de unas 6-10  $\mu\text{m}$  con pequeñas partículas de TiC. Las propiedades mecánicas a alta temperatura de esta aleación se estudiaron mediante ensayos de torsión a temperaturas comprendidas entre 850 y 1200°C. Los resultados de estos ensayos se analizaron utilizando la ecuación de Garofalo. Los valores que se obtuvieron para la F de Snedecor y el coeficiente de regresión garantizan que los datos puedan ser correlacionados por una única ecuación. Se encontró un valor para la energía de activación para la deformación plástica más elevada que la energía de autodifusión del hierro a través de la red austenítica y un exponente de la tensión muy superior a 5, lo cual sugiere que la deformación del material está controlada por un mecanismo de movimiento de dislocaciones que alcanza rápidamente la zona exponencial.

Palabras clave: Superaleación, Conformado, Ecuación de Garofalo, Ecuación de Liapunov.

**Abstract:** In the present work, the conformation parameters of a superalloy with a high content of chromium and nickel are studied, introducing 0.9% of Ti and increasing the C up to 0.2% by mass. The resulting material presents a microstructure of equiaxed grains of about 300  $\mu\text{m}$ . After different thermomechanical treatments simulated with torsion tests, a grain refinement with sizes of about 6-10  $\mu\text{m}$  with small TiC particles is observed. The high-temperature mechanical properties of this alloy were studied by torsion tests at temperatures between 850 and 1200 °C. The results of these tests were analyzed using the Garofalo equation. The values that were obtained for the Snedecor F and the regression coefficient guarantee the data can be correlated by a single equation. A value for the activation energy for the plastic deformation was found to be higher than the self-diffusion energy of the iron through the austenitic network and an exponent of the tension much higher than 5, which suggests that the deformation of the material is controlled by dislocation climb mechanism that quickly reaches the exponential zone.

Keywords: Superalloy, Forming, Garofalo's equation, Liapunov's equation.

## 1. INTRODUCCIÓN

Las aleaciones Fe-Cr-Ni han sido ampliamente utilizadas en el último medio siglo como material estructural en una gran variedad de aplicaciones que exigen alta resistencia a la corrosión. Sin embargo, los aceros inoxidable austeníticos usuales tienen el inconveniente de no alcanzar elevados valores de resistencia, que cae aún más trabajando a elevadas temperaturas. En este trabajo se ha propuesto una forma efectiva de mantener la resistencia a las mencionadas temperaturas mediante la introducción de una distribución de partículas finas de segunda fase distribuidas homogéneamente en la matriz. La precipitación de partículas de segunda fase en aleaciones Fe-Cr-Ni incluye la adición de una cierta cantidad de elementos intersticiales, carbono y/o nitrógeno, y elementos estabilizadores de carburos [1,2], donde los carburos M<sub>23</sub>C<sub>6</sub> son las partículas

endurecedoras preferidas. Las fabricadas se basaron en acero austenítico, tipo AISI 304. Elementos con alta afinidad con el carbono y el nitrógeno, como el titanio, se introducen para promover el precipitado intragranular de carburos MC, carbonitruros y nitruros [3,4]. Esta investigación está dirigida al estudio de las temperaturas y comportamiento mecánico de 30Ni-20Cr inoxidable dopado con Ti y nitrógeno. Basado en la consideración del peso atómico relativo del titanio y del Carbono, el contenido de titanio requerido para estabilizar el TiC es aproximadamente cuatro veces el contenido de carbono. Así, para un Contenido de Ti de 0,9% será necesario un contenido de carbono de aproximadamente 0,2% en peso. La relativamente baja ductilidad de este tipo de material y la alta sensibilidad a los parámetros de conformado nos han llevado a estudiar los valores óptimos de temperatura y velocidad de deformación para conseguir un semiprodueto sin grietas.

## 2. PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL Y RESULTADOS

La composición fue la siguiente (% en masa): 38.07Ni – 20.6Cr -0,58Mn - 0,5Al - 0,9Ti - 0,1Si - 0,03C-0,009N, balance de Fe. Las microestructuras del material recibido y después de la deformación se estudiaron mediante microscopía óptica y electrónica de barrido.

En las figuras 1-3 se aprecia la evolución de la estructura tanto por efecto térmico como termomecánico.

Se puede apreciar que a 950°C no se ha producido una recrystalización dinámica completa despues de torsionar hasta rotura mientras que a 1200 se ha conseguido una recrystalización con una estructura de grano fino ( $\approx 6 \mu\text{m}$ ) y carburos de Titanio del mismo orden (Figura 3). Las propiedades mecánicas a temperatura elevada se estudiaron mediante ensayos de torsión. Se llevaron a cabo ensayos en caliente a velocidades de deformación comprendidas entre 2 y 20  $\text{s}^{-1}$  en el intervalo de temperaturas desde 850 hasta 1250 °C. La tensión equivalente y la deformación se calcularon a partir del par experimental usando la relación de Fields y Backofen [5].

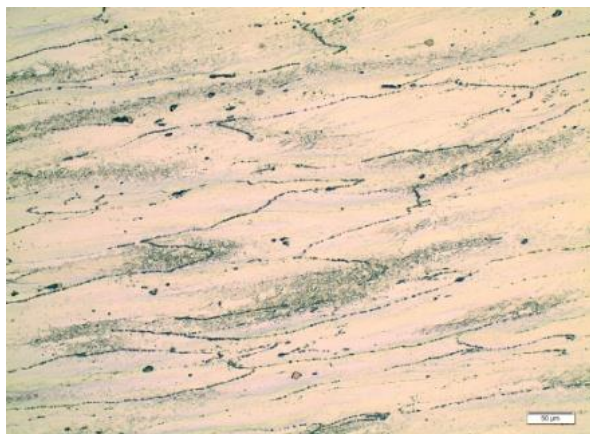
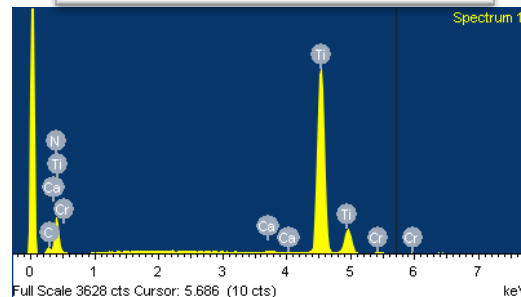
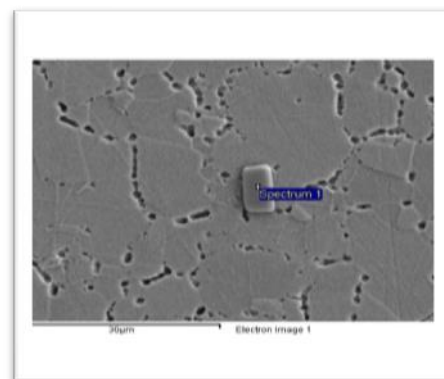


Figura1. Material torsionado a  $4\text{s}^{-1}$ , 950°C.



Figura 2. Material torsionado a  $4\text{s}^{-1}$ , 1200°C.



Figuras 3a y 3b. Microestructura y espectro de EDX de una partícula de CTi.

Para estudiar el comportamiento del material en un amplio rango de condiciones es conveniente utilizar la ecuación de Garofalo [6,7,8]. Solución inicial:

$$\dot{\epsilon} e^{\frac{Q}{RT}} = A \cdot [\sinh(\alpha \cdot \sigma)]^n \quad (1)$$

en la cual el primer término es el parámetro de Zenner Hollomon

$$Z = \dot{\epsilon} e^{\frac{Q}{RT}} \quad (2)$$

Para que estos algoritmos alcancen una solución fiable es importante partir de una solución inicial lo más cercana posible a la final. En este trabajo se ha utilizado un algoritmo ad hoc que minimiza el error entre los resultados experimentales y los que proporciona la ecuación en función de los valores posibles de  $\alpha$ . Este método parece el adecuado ya que  $\alpha$  determina la dispersión de valores de Z y suele tener valores en torno a 0.01 e inferiores a 0.1 [9,10]. Con los datos experimentales se ha obtenido una solución inicial única de valor  $\alpha=0.0063$ . Los valores son bastante buenos considerando las diferentes correlaciones.

Para visualizar el resultado pasamos de  $R_3$  a  $R_2$  mediante el cambio

$$(Z = \dot{\epsilon} e^{\frac{Q}{RT}})$$

así podemos representar  $\ln Z$  frente a  $\ln \sinh(\alpha \sigma)$  a partir de la solución obtenida (Tabla 1):

$$\ln \dot{\epsilon} e^{\frac{369000}{2T}} = \ln \exp(26.9 \sinh(0.004 \sigma))^{9.11}$$

Tabla 1.

| $\alpha$ óptimo | $\ln(A)$ | n    | Q/R cal/mol | maxerr   | mse       | R(ln(epsilon)) | R(1/T)   | R(ln(sinh(...))) |
|-----------------|----------|------|-------------|----------|-----------|----------------|----------|------------------|
| 0.0041          | 26.9     | 9.11 | 44369.3     | 0.649702 | 0.0881051 | 0.896449       | 0.988114 | 0.990546         |

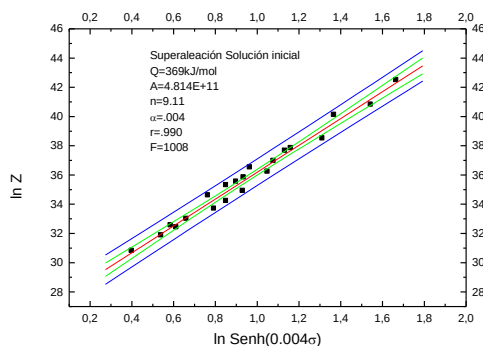


Figura 4. Solución Inicial.

A partir de la solución inicial obtenida y mediante otro algoritmo iterativo [6] obtenemos la solución que consideramos definitiva:

$$\varepsilon' \exp 382.000/2T = \exp 27.62 \sinh(0.0042\sigma)^{9.2}$$

$$r=0.991, F=1068$$

Como se puede apreciar los valores son del mismo orden pero la correlación y F de Snedecor son superiores en la solución final lo que garantiza una mejor adecuación de la ecuación al comportamiento del material.

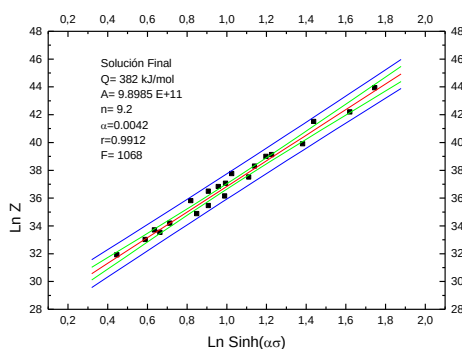


Figura 5. Solución final

El paso siguiente es calcular las condiciones optimas de conformado, para ello utilizamos la segunda ley de Liapunov,  $L_2$  que determina la estabilidad entrópica del sistema [11],

$$L_2 = \left( \frac{\delta S}{\delta \ln \varepsilon} \right)_{\Gamma, \sigma} < 0 \quad (3)$$

siendo S una función de  $\varepsilon$ , T.

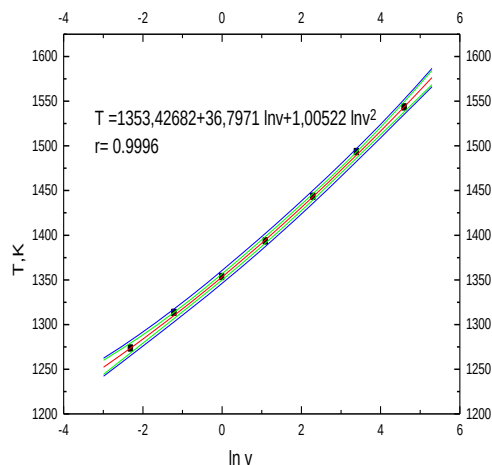


Figura 6. Valores óptimos de conformado (T,v)

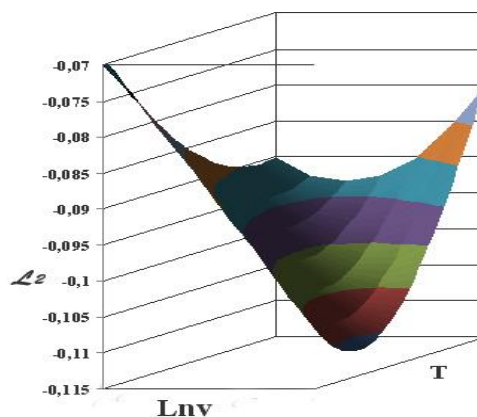


Figura 7. Superficie de la 2ª función de Lyapunov

En este trabajo se ha utilizado el programa excel que proporciona los resultados de las figuras 6 y 7 correspondiente a los valores mínimos de la superficie generada (figura 7). Por ejemplo a la velocidad de  $10 \text{ s}^{-1}$ , -0,09735 corresponde una temperatura de tratamiento de 1443 K.

### 3. CONCLUSIONES

La adición de Titanio ha mejorado las propiedades de la aleación inicial.

La segunda ecuación de Lyapunov permite optimizar los parámetros de conformado.

La ecuación de Garofalo reproduce el comportamiento del material al menos en el dominio y recorrido de los ensayos.

Los paquetes comerciales junto al algoritmo iterativo desarrollado ad hoc dan información fiable en el dominio y recorrido de las variables de tratamiento.

**Agradecimientos.**

Este trabajo ha sido realizado con la ayuda del Proyecto MAT2015-68919-C3-1-R (MINECO/FEDER)

**4. REFERENCIAS.**

- [1] K. G. Brickner and I. D. Defillippi: Handbook of Stainless Steels, eds. by D. Peckner and I. M. Bernstein, McGraw-Hill, New York, (1977), 20-1.
- [2] E. Truman: Materials Science and Technology: A Comprehensive Treatment, Vol. 7-Constitution and Properties of Steels, ed. by F. B. Pickering, VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim, (FRG), (1992), 527.
- [3] H. I. Harding and R. W. K. Honeycombe: J. Iron Steel Inst., 204 (1966), 259.
- [4] F. H. Froes and D. H. Warrington: Trans. Metall. Soc. AIME, 245 (1969), 2009.
- [5] D. S. Fields and W. A. Backofen: Am. Soc. Test. Mater. Proc., 57 (1957), 1259.
- [6] C. García, M. Carsí, F. Peñalba y M.P. de Andrés. "Structure-Thermomechanical parameters relationship and Zener-Hollomon equation for two vanadium microalloyed steels"; J. Mater. Sci., 27, 17 (1992) 4567-4576.
- [7] M. Carsí, F. Peñalba, I. Rieiro, F. Zapirain y O.A. Ruano "Hot forging of a Cu-Al-Ni-Fe-Mn alloy and its simulation by torsion testing", Z. Metallkd. 91(2000) 1057-1062.
- [8] M. Carsí, F. Peñalba, I. Rieiro, O. A. Ruano "High temperature workability behaviour of a modified P92 steel", Int. J. Mat. Res. (formerly Z. Metallkd.) 102 (2011) 11, 1378-1383.
- [9] F. Garofalo "An empirical relation defining the stress dependence of minimum creep rate in metals" Transactions of The Metallurgical Society of AIME dec. 1963 vol 227, 1474-1477.
- [10] H.J. McQueen, N.D. Ryan "Constitutive Analysis in Hot working", Mat Sci and Eng A322 (2002) 43-63
- [11] I. Rieiro, Tesis Doctoral. Universidad Complutense, Madrid (Spain) Junio, 1997.

## TRENDS ON ICT IN MATERIALS SCIENCE EDUCATION

*F. Lloret<sup>1</sup>, J. Piñero<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Dpto. Ciencia de los Materiales e IM y QI, Universidad de Cádiz, 11510, Pto. Real (Cádiz) España,  
Fernando.lloret@uca.es

<sup>2</sup>Dto. Didáctica, Universidad de Cádiz, 11510, Pto. Real (Cádiz) España

**Abstract:** Information and Communication Technologies (ICT) probably represent the greatest opportunities for and challenges to the formal educational process. One of the main power of ICT is that students are highly familiarized with new technologies and they represent a friendly tool and a nearer and free-flowing communication channel with the professor and the subject it-self. This work shows up the great advantages that ICT represent in the education work, focused on the materials science education and its laboratory practices. The study is not limited to the implementation of the use of pcs and/or tablets in the classes. The idea is to import to the normal behavior of the teaching process the tools that these ICT provide and with the ones the students are very familiarized.

**Key words:** ICT, Information and Communication Technologies, Materials science education.

## 1. INTRODUCTION.

Building upon the disruption to lecture-based methods triggered by the introduction of problem-based learning, approaches to promote self-learning are becoming increasingly diverse, widespread and generally well accepted within materials science education. New technologies are changing the world and, consequently, the classic educational activities. Information and Communication Technologies (ICT) arrived some decades ago revolutionizing our day to day. This ICT are already implanted in most of the syllabus of the Spanish universities. However, their huge potential has not been exploited in most of the cases. Students today need to learn new abilities as how to search for databases, interpret models, or criticize electronic sources to succeed in school and in the workplace. They are indeed required to master ICT effectively [1-3]. Digital technologies offer new resources for learning, support new modes of instruction, and amplify opportunities for science education research [4].

Our primary thesis is ICT represent an improvement in learning opportunities in the education work, particularly in the field of materials science education and its laboratory practices. Academic achievement only based on traditional methods had shown unsatisfactory results. The many abstract subjects studied during the science bachelor degrees become in obstacles that make students difficult to establish the concept of knowledge. Learning by using ICT allows students using computer animation to understand the concepts learned and help that learning can be done independently, making learning becomes easier [4]. Indeed, Chi's Interactive-Constructive-Active-Passive (ICAP) framework [5, 6] highlights the advantages and skills that are developed under this approach. Among them the interactive learning (co-constructing new information with others), constructive learning

(generating new information) and active learning (selecting information for emphasis).

In contrast, it takes too much training, preparation and production of appropriate materials for such learning to be more effective [7]. The idea of this work is to import to the normal behavior of the teaching process the tools that these ICT provide and with the ones the students are very familiarized [8]. As first approach, the use of tutorial videos instead of the classic practice manual paper can result in a larger number of students attending with the needed background knowledge to the practice. Moreover, the employ of simulation software not only for the explaining of abstract concepts but for the repetition of lab practices at home will also increase the probability of success of the students as well as an increase on the interest of them for the subject. In fact, nowadays are plentiful of strategies that can help to the student in the success of their studies. This is the aim of this study: the analysis of the impact of ICT tools in the material science classes and the providing of example that can be implemented by the professors in their daily teaching activities.

## 2. BENEFITS OF THE USE OF ICT.

Instructional technology seems to have reached a tipping point in the ease of creating, maintaining, and delivering digital media over the Internet as well as in learners' readiness to use such technologies in place of attending lectures [9]. ICT has the potential to play an important role in making the study of science more relevant, interesting and motivating for students, and it offers opportunities to break the boundaries between university and society. This interest has been generated by widespread recognition that content can now easily be made available online in advance of class so that resources, including class time, can be dedicated to review, consolidate, and



apply that content. In the specific case of materials science, there is a huge number of ICT available for both, professor and student that can be easier the teaching and learning labors [8]. As has been mentioned, the simple use of youtube videos make closer to the students the topic of study. It has been reported the important role that Youtubers play in the life of teenagers [10] and it is one of the first source of information used by them. The uploading of videos by the professor or the suggestion of ones already uploaded and revised can be a successfully practice for the teaching labor. However, ICT provides more advantages than youtube. Consequently, it is now possible to imagine that in-class lectures with the primary goal of covering course content will become obsolete, as will students' willingness to sit through lectures in the classroom that they can watch at their own pace and time.

Multimedia software for simulation of processes and carrying out 'virtual experiments', publishing and presentation tools, digital recording equipment, computer projection technology, computer-controlled microscope and tools for data capture, data logging systems, databases and spreadsheets, graphing tools and modelling environments, are ICT available to help in the education process. These forms of ICT can enhance both the practical and theoretical aspects of science teaching and learning, being their potential contribution of technology conceptualized in six ways: (i) Optimizing work production. Computer-based simulations may provide better support for the development of theoretical understanding than practical work, expediting and enhancing work production. It is based in following facts: It is not needed to deal with the use of any apparatus. Results will not depend on the machine handling. But the main advantage is that simulation can offer simultaneous representation of the real and theoretical behavior of the system under investigation for comparison. Moreover, the data sets generated can be more extensive than could be gathered experimentally by one group or class of students [11]. (ii) Bring up to date and increase relevance of practices and experiences. Simulation software allow to reproduce experiments that are not possible to carry out in a standard university lab. Moreover, the possibility to use web-based learning materials increase the authenticity of the results thanks to the continuously updating. There are several examples where students can communicate with researchers and participate in research projects in collaboration with others [12, 13]. (iii) Develop exploration and experimentation. The use of graphing or modelling tools provides dynamic, visual representations of data collected electronically or otherwise. Through providing immediate link between an activity and its results, the likelihood is increased that students will relate the graphical representation of relationships to the activity itself [8]. (iv) Focusing attention on overarching issues. The interactive nature of tools such as simulations, data analysis software and graphing technologies can be influential in allowing

students to visualize processes more clearly. Computer analytic facilities are advantageous over manual methods in allowing a more holistic and qualitative approach to student analysis of trends and relationships between variables in a graph rather than individual data points. (v) Fostering self-regulated and collaborative learning. Students working with various tasks at the computer may work more independently of the teacher, and at their own pace. Digital learning environments can be designed so that students can work collaboratively [1,14]. (vi) Improving motivation and engagement. The idea that using ICT enhances student motivation has gained currency in recent years [15-18].

The most effective uses of ICT are those in which the teacher and the software can challenge student understanding and thinking, either through whole-class discussions, using an interactive whiteboard or through individual or paired work on a computer [19]. Both whole class and individual work can be equally effective if the professor has the skills to organize and stimulate the ICT-based activity.

### 3. USEFUL FREE SOFTWARE FOR MATERIALS SCIENCE TEACHING.

There are several software and tools available in the science community that can be used during the Materials Science teaching. The use of research software has the advantage to provide professional tools to the student that can be used in their future career. To help in the implementation of such uses, here are proposed different free-access software for different aspects of the teaching/learning process.

**3.1 Vesta software** [20]. This simulation software allows the design and manipulation of several crystal structures and drawing specific crystallographic planes. The three-dimensional environment permits the student to have a better spatial vision, and understand concepts as interplanar spacing, lattice parameter or unit cell. The use of planes can help in the learning of miller indices and planar direction. Moreover, all kind of structures with their specific lattice distances can be designed supporting the professor for the explanation of Bravais lattices and the different crystal systems. The use of this software also brings the possibility of realize many different exercises and examples.

**3.2 SRIM software** [21]. As an introduction to the monte-carlo simulation, SRIM software allows student to understand concept as the electron/ion beam penetration, carrier transport or energy loss as well as statistic concepts. But it can be also very useful in the understanding of materials properties since there is the possibility to simulate different materials of beam impinging, noticing the relevance of their properties.

**3.3 Kahoot platform** [22]. It is a web platform that converts the tests into games. It allows professor to motivate student with a game-based web platform and

testing friendly their aptitudes. There are different kind of quizzes that can be used for different purposes. This tool also push student learning based in the competition sense, and can be used individually and in groups. Moreover, it can be a useful instrument to check the improvements of the class by realizing the same test before and after the lectures.

#### 4.- CONCLUSIONS.

This work highlights the interest in using ICT for the materials science teaching. Based on the literature, authors push professors to implements new technologies in their class, the use of real data from web sites and the introduction of research software in their examples and exercises. To help in the achievement, at the last part of the manuscript, three different softwares are proposed. They cover a large range of uses, are free and have a friendly interface.

#### 9.- REFERENCES.

- [1] Linn M. C., "Technology and science education: starting points, research programs, and trends". *International Journal of Science Education*, 22(6), 727-758, 2003.
- [2] Oliver R., "The role of ICT in higher education for the 21st century: ICT as a change agent for education". *HE 21 conference proceedings*, 2002.
- [3] Ananiadou, K. and M. Claro., "21st Century Skills and Competences for New Millennium Learners in OECD Countries". *OECD Education Working papers*, No. 41. OECD Publishing, Paris, 2009.
- [4] Attewell J, et al., "Impact of mobile learning: examining what it means for teaching and learning". *London, Learning, and skills network*, 2009.
- [5] Chi M. T. and VanLehn K. A., "Seeing deep structure from the interactions of surface features." *Educational Psychologist*; 47:177–88, 2012.
- [6] Chi M.T., "Active–constructive–interactive: A conceptual framework for differentiating learning activities". *Topics in Cognitive Science*; 1:73–105, 2009.
- [7] Livingstone S., "Critical reflections on the benefits of ICT in education". *Oxford Review of Education*, 2014.
- [8] Osborne J. and Hennessey S., "Literature Review in Science Education and the Role of ICT: Promise, Problems and Future Directions". (No. 6): *Nesta Futurelab*, 2003.
- [9] Cook D. A., Levinson A.J., Garside S., Dupras D.M., Erwin P.J. and Montori V.M., "Instructional design variations in internet-based learning for health professions education: A systematic review and meta-analysis". *Academic Medicine*; 85:909–22, 2010.
- [10] Westenberg W., "The influence of YouTubers on teenagers" *Msc Thesis, University of Twente*, 2016.
- [11] McFarlane A. and Sakellariou S., "The Role of ICT in Science Education". *Cambridge Journal of Education*, 32(2), 219-232, 2002.
- [12] Globe program, <https://www.globe.gov/>
- [13] European Organization for Nuclear Research, CERN <https://scool.web.cern.ch/content/downloads>
- [14] Scardamalia M. and Bereiter C., "Computer Support for Knowledge-Building Communities". In T. Koschmann (Ed.), *CSCL: Theory and Practice of an Emerging Paradigm*. Mahwah; NJ: Lawrence Erlbaum, 1996.
- [15] Campbell L. P., "On the horizon: A computer in every classroom". *Education*, 104(3), 332-334, 1984.
- [16] Rieber L. P., "Animation, Incidental Learning, and Continuing Motivation". *Journal of Educational Psychology*, 83(3), 318-328, 1991.
- [17] Schofield J. W., "Computers and Classroom Culture". *New York: Cambridge University Press*, 1995.
- [18] Cox M., "Information and communications technologies: their role and value for science education". In M. Monk & J. Osborne (Eds.), *Good practice in science teaching. What research has to say*. Maidenhead, Philadelphia: Open University Press, 2000.
- [19] Cox M. and Webb M.E., "ICT and Pedagogy: A Review of the Research Literature". *Coventry, London: British Educational Communications and Technology Agency/Department for Education and Skills*, 2004.
- [20] VESTA software, <http://jp-minerals.org/vesta/en/>
- [21] SRIM software, <http://www.srim.org/>
- [22] KAHOOT web platform, <https://kahoot.com/>

## KINETIC STUDY OF AN AA7075 ALLOY UNDER T6 HEAT TREATMENT

*B. J. M. Freitas<sup>1</sup>, D. Silva<sup>2</sup>*<sup>1</sup>Universidade Federal de São Carlos (UFSCar), Rod. Washington Luís, s/n, 13565-905 São Carlos, SP<sup>2</sup>Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), Estr. Dos Pioneiros, 3131, Londrina, PR  
[brenda.martinsf@hotmail.com](mailto:brenda.martinsf@hotmail.com)

**Summary:** High performance aluminum alloys are widely used in aircraft industry because of their high strength, low density and good response to heat treatments. The kinetics of phase precipitation of an AA7075 alloy under T6 heat treatment were characterized in three different solutions and aging conditions. Hardness and tensile testing were performed to determine the mechanical properties. Characterizations of the precipitation states was carried out by scanning electron microscopy (SEM). In the optimal T6 condition, AA7075 samples obtained a hardness value of 91.72 HRB after solution treatment at 465 °C/90 min and aging treatment at 120 °C/12 hours. The hardness values affect significantly the tensile strength of the AA7075 alloy, being possible to obtain an UTS value of 720 MPa.

**Keywords:** T6 heat treatment, AA7075, mechanical properties, precipitation kinetics.

## 1. INTRODUCTION

Aluminum is the non-ferrous metal most used worldwide, and in the last years, its consumption increased significantly. Aluminum alloys are very attractive to aeronautic and automobile industry because of their good mechanical properties and their low density [1, 2].

Alloys based on the Al-Zn-Mg-Cu system, such as the 7xxx series, are used to fabricate aircraft parts with T6 heat treatment. The good response to the temper is because the precipitation of second phases, such as MgZn<sub>2</sub>, that increase the mechanical properties [1-3].

The common T6 heat treatment involves solution treating the AA7075 alloy at 480 °C for 1 h, rapid quenching in water and age hardening at 121 °C for 24 h [4].

In high alloys aluminum performance, such as the AA7075 alloy, heat treatments are very important and represent an expensive step of the processing, being limited by the time and the temperature applied. The aim of this study is to investigate the relationship between the variation, from the common T6 treatment, of the processing parameters (solution and aging treatment temperature) on the microstructure and on the mechanical properties of the alloy.

## 2. EXPERIMENTAL PROCEDURE

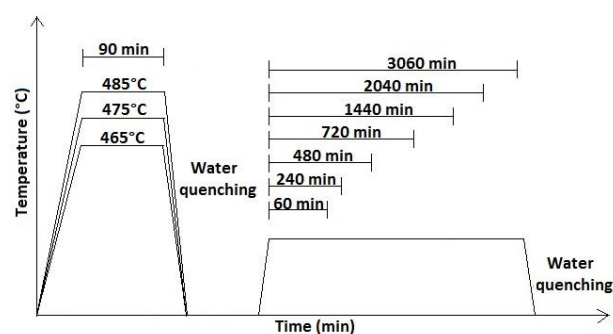
Commercial AA7075 alloy in the form of cylindrical bars of 16 mm diameter was used to carry out this study. The chemical composition determined by spectral analysis is shown in Table 1.

**Table 1.** Chemical composition (wt%) of AA7075.

| Cu   | Mn   | Mg  | Cr   | Zn   |
|------|------|-----|------|------|
| 1,87 | 0,28 | 2,4 | 0,24 | 5,30 |

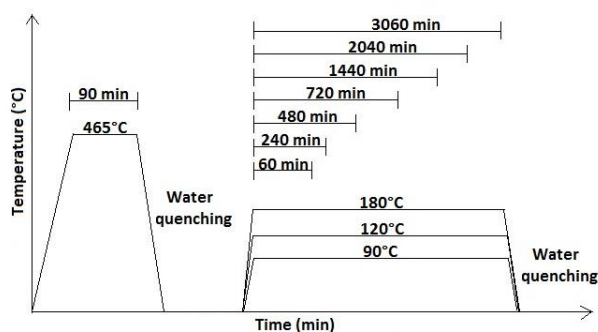
This study was performed in two steps. First, the solution treatment was investigated and, in the second step, the aging treatment was analyzed.

The samples were exposed to three solution treatment temperatures, 465, 475 and 485 °C and then they were artificially aged at 120 °C for different periods. The scheme of the solution treatment procedure is shown in Figure 1.



**Figure 1.** Scheme of the solution treatments procedure.

After analyzing the solution effect on the hardness, different aging treatment temperatures were investigated. Therefore, the samples were exposed to solution treatment at 465 °C and then the aging treatments were performed at 90, 120 and 180 °C for different periods. The scheme of the aging treatment procedure is shown in Figure 2.



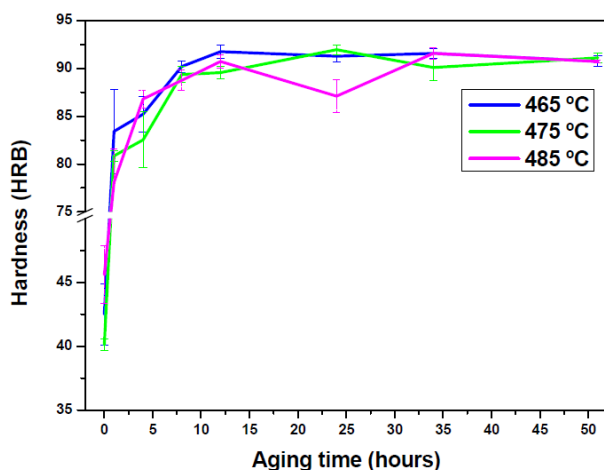
**Figure 2.** Scheme of the aging treatments procedure.

The mechanical properties measurements were made at ambient temperature. The heat-treated specimens were cut, prepared and etched with Keller's and the microstructural characterization were made by scanning electron microscopy (SEM).

Based on hardness (Rockwell B) and microstructural results (SEM), the optimal T6 treated sample, solution treated at 465 °C/90 min and aged at 120 °C/12 h, was analyzed by X-ray diffraction technique and tensile tests.

### 3. RESULTS AND DISCUSSION

Fig. 3 shows the variation of hardness with aging times in the 7075 Al alloy previously solution treated at 465, 475 and 485 °C and aged at 120 °C.

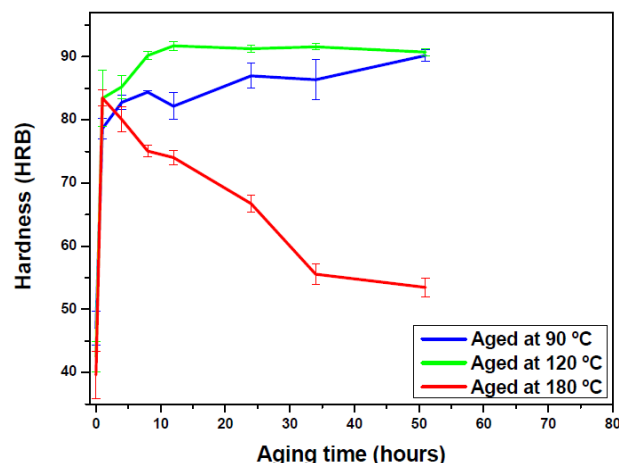


**Figure 3.** Variation of hardness with aging time to three solution treatment conditions.

The similarity of the curves obtained at different solution treatment temperatures may be associated with the dissociation of a similar amount of intermetallic phases, which are responsible for the formation of the fine precipitates in the aging step.

At 465 °C solution temperature, the hardness peak was in 12 hours of aging, remaining relatively stable up to the period of 51 hours. At 475 and 485 °C solution temperature, the samples showed hardness peaks in 24 and 34 hours, respectively.

In the second step of this study, the 465 °C solution temperature was applied because it was the one that presented the hardness peak with the shortest time. Fig. 4 shows the variation of hardness with aging times in the alloy solution treated at 465 °C and aged at 90, 120 and 180 °C.



**Figure 4.** Variation of hardness with aging temperatures of 90, 120 and 180 °C.

At 90 °C aging temperature the maximum hardness was 90.20 HRB after 51 hours of aging. At lower aging temperatures, the samples showed a slow hardness increase over the time due to the low diffusion rate.

On the other hand, at 120 °C aging temperature the maximum hardness was 91.72 HRB after only 12 hours of aging. The higher efficiency presented in this condition may be associated with the combination of moderate diffusion and nucleation rates at this temperature.

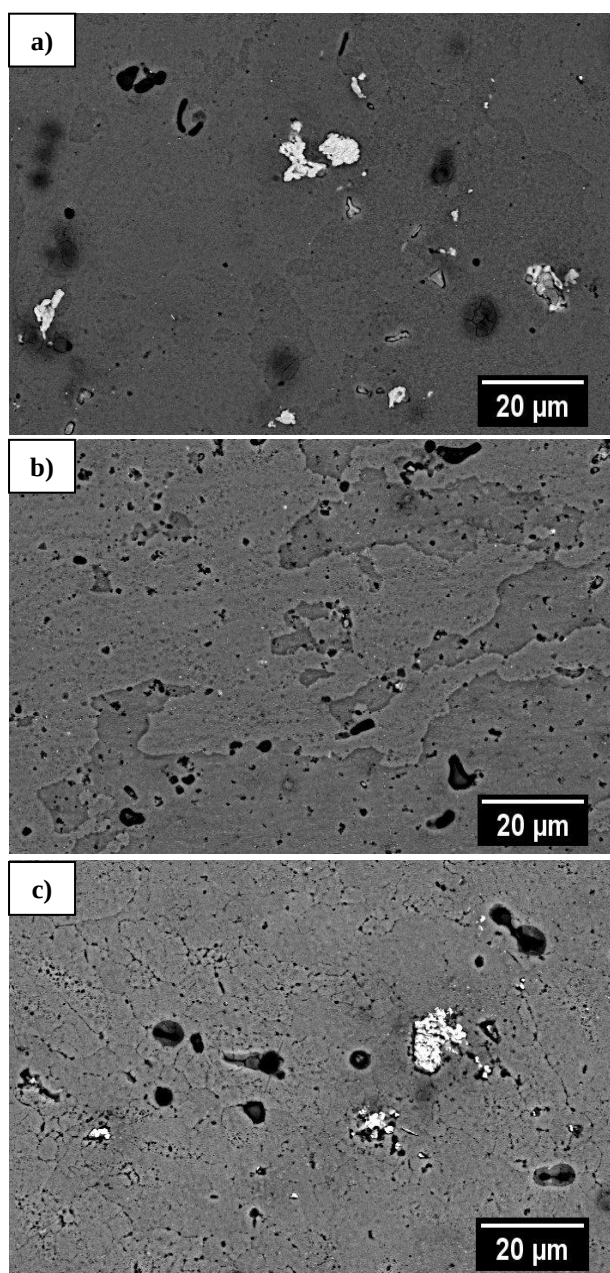
At 180 °C aging temperature the maximum hardness was 83.46 HRB after 1 hour of aging. The hardness decrease over the time of aging, indicating the phenomenon known as super-aging. The high temperature and the long aging times favor the growth of the precipitates, which generates the reduction of the resistance due to the low efficiency in preventing the movement of the dislocations during the deformation [3].

Fig. 5 shows SEM photographs of solution treated (465 °C/1 h) samples aged at 90, 120 and 180 °C in their hardness peak. The results suggest that the precipitates are  $\eta'$  and it is possible to observe a higher density within the grain boundary of the alloy [5, 6]. In the sample aged at 90 °C/51 h (Fig. 5a) there are few and coarse precipitates on the matrix. In this condition, there is a higher degree of saturation which increases the nucleation rate, however, the diffusion rate is low due to the low temperature, which results in a lower precipitation rate (51 hours to achieve in the hardness peak). In this case, the diffusion rate controls the precipitation process, causing it to occur slowly, damaging the growth of several nuclei by the matrix.



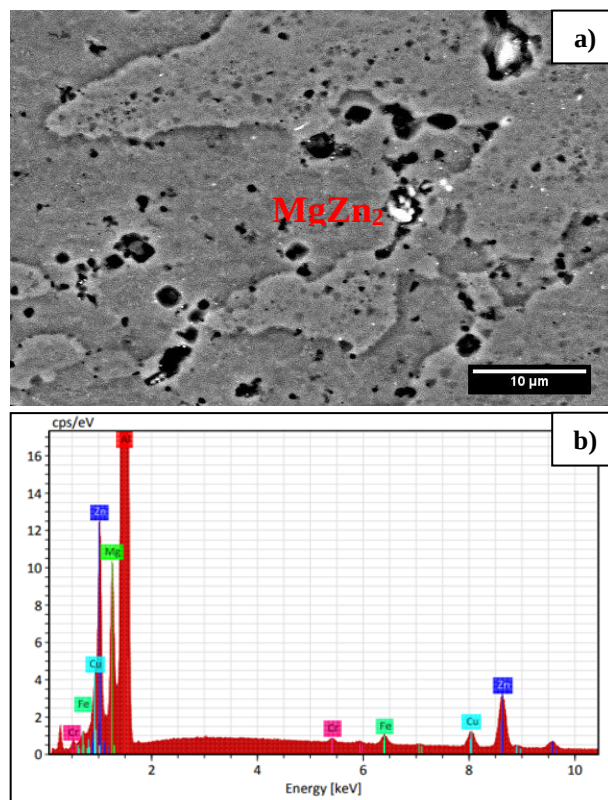
In the sample aged at 120 °C/12 h the precipitates are finely distributed throughout the matrix (Fig. 5b). There is an optimum balance between the diffusion rate and the supersaturation of the elements in the matrix. The higher saturation degree promotes nucleation throughout the matrix and the higher diffusion rate contributes to the growth of the nuclei formed, resulting in small precipitates with greater dispersion throughout the matrix.

In the sample aged at 180 °C/1 h the precipitates are coarse and are present in the grain boundaries (Fig. 5c). Because of the high aging temperature, the diffusion rate increases, but the alloy has a lower saturation degree, which results in a low nucleation rate. Precipitation occurs in places of greater energy, such as in the grain boundaries.



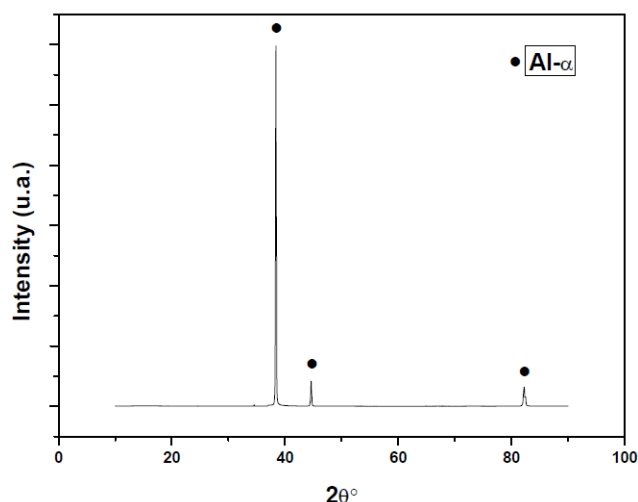
**Figure 5.** SEM photographs of solution treated at 465 °C/1 h samples aged at a) 90 °C/51 h, b) 120 °C/12 h and c) 180 °C/1 h.

Therefore, the T6 treatment condition that favored the hardness increase and lower energy expenditure was the T6 treatment using the aging temperature of 120 °C/12 h. Fig. 6 shows the analysis by dispersive energy spectroscopy of the precipitates presents in this sample and it was possible to identify them as a precipitate rich in Mg and Zn. Another dispersive energy spectroscopy analyzes shown precipitates rich in copper, as expected.



**Figure 6.** a) High magnification SEM microphotograph and b) EDS analyses of the sample aged at 120 °C/12 h.

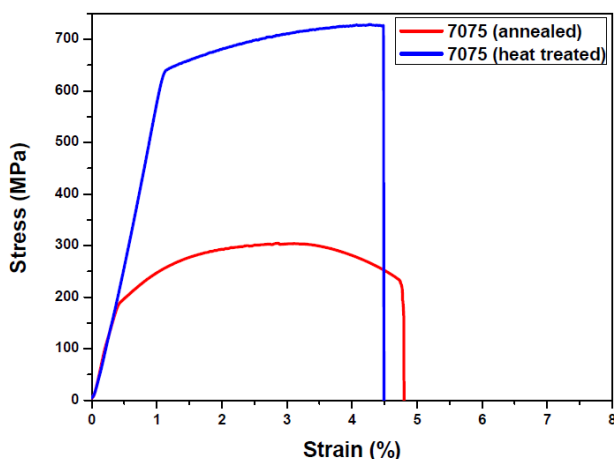
X-ray diffraction analysis identified only the Al- $\alpha$  phase. It may be associated with the greatest precipitates refinement and low quantity, making no possible to identify the precipitate peaks (Fig. 7).



**Figure 7.** X-ray diffraction analysis to the sample aged at 120 °C/12 h.



Fig. 8 shows the tensile properties of the optimum T6 treated specimen, solution treated at 465 °C/90 min and aged at 120 °C/12 h in comparison with the AA7075 annealed alloy (300 °C/1 h). The T6 heat-treated specimen shows a high resistance (ultimate stress of ~720 MPa and yield stress of ~652 MPa) due to the effective precipitation process in comparison with the annealed specimen (ultimate stress of ~305 MPa and yield stress of ~213 MPa). This increase in the mechanical resistance is due to the effective barrier to the movement of the dislocations provided by the presence of the precipitates.



**Figure 8.** Tensile properties for 7055 alloy heat treated and annealed.

The T6 tensile specimen and the annealed tensile specimen has a hardness value of 91.72 HRB and 42.28 HRB, respectively. These results agreed with the literature [4], where the increase of hardness of the alloy promotes a linear increase in the yield stress and in the ultimate tensile stress. Therefore, the hardness measurements could be used as a predictor for tensile strength of the AA7075 alloy.

#### 4. CONCLUSIONS

Heat treatments applied in AA7075 alloys are arguably essential to confer to these materials their high mechanical strength; however, these treatments will cause a cost increase, mostly due to the energy associated with the process, what will affect the final product cost. Therefore, this paper studied the influence of the solution and aging treatment temperature during T6 heat treatment.

The small variation in the solution treatment temperature ( $\pm 10$  °C) is not able to promote a significant change in the saturation degree of the alloy. Consequently, the hardness values will not change significantly after the same aging treatment condition.

The aging treatment temperature has an important influence on the final microstructure and on the mechanical properties. At 90 °C the aging process is extremely slow, making it take a long time to obtain an optimal hardness level. In addition, at 180 °C the super-

aging phenomenon occurs. Then, the optimum aging temperature is 120 °C/12 h.

The hardness values affect significantly the tensile strength of the AA7075 alloy.

#### 5. REFERENCES

- [1] American Society for Metals - ASM. Handbook. Properties and selection. "Nonferrous Alloys and Special-Purpose Materials". ASM International Handbook Committee, v. 2, p. 137-38, 1990.
- [2] Williams, J. C.; Jr Starke, E. A., "Progress in Structural Materials for Aerospace Systems". Acta Materialia, 51(19), p. 5775-5799, 2003.
- [3] Esmailian, M. et al., "Effect of T6 and Re-Aging Heat Treatment on Mechanical Properties of 7055 Aluminum Alloy". World Academy of Science, Engineering and Technology International Journal of Materials and Metallurgical Engineering, v. 9, n. 11, 2015.
- [4] Clark Jr, R.; et al., "On the Correlation of Mechanical and Physical Properties of 7075-T6 Al Alloy". Engineering Failure Analysis, v. 12, p. 520-526, 2005.
- [5] Kim, S. W., "The Study on Characteristics of Heat Treatment of the Direct Squeeze Cast 7075 Wrought Al Alloy". Materials Science and Engineering A, 304-306, p. 721-726, 2001.
- [6] Jin-Feng, LI. et al., "Mechanical Properties, Corrosion Behaviors and Microstructures of 7075 Aluminum Alloy with Various Aging Treatments". Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 18, p. 755-762, 2008.

**I+D+i EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA DE MATERIALES****NACE CYTES, EL GRUPO ESPECIALIZADO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍAS DE SUPERFICIES****A. Palmero<sup>1</sup>, J. Santiso<sup>2</sup>, J.M. Albella<sup>3</sup>**<sup>1</sup>Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla. Avda. Américo Vespucio 49. 41092 Sevilla. España<sup>2</sup>Institut Català de Nanociència i Nanotecnologia, UAB Campus, Bellaterra (Barcelona), 08193, España<sup>3</sup>Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid. Sor Juana Inés de la Cruz 3, 28049 Madrid. España

**Resumen:** El grupo especializado CyTeS (Ciencia y Tecnología de Superficies) de la Sociedad Española de Materiales (SOCIEMAT) nace con la vocación de aglutinar la actividad que se desarrolla en España dentro del marco de las tecnologías de modificación y funcionalización superficial de materiales. En este artículo se expone brevemente una panorámica sobre su origen, las iniciativas desarrolladas y las actividades futuras, tanto las relacionadas con la investigación académica como aquellas con una vertiente más aplicada y de carácter industrial. La necesidad de dar visibilidad a esta red y coordinar diversas necesidades de formación, investigación y transferencia dentro de esta comunidad de trabajo se presentan como fundamento y razón de ser del grupo CyTeS

**Palabras clave:** Ciencia y Tecnologías de Superficie. Película Delgada. Recubrimientos. Grupo Especializado.

El pasado día 8 de Marzo de 2018 se aprobó la creación de un grupo especializado en Ciencia y Tecnologías de Superficie (CyTeS) en la Sociedad Española de Materiales (SOCIEMAT). La formación de este grupo está motivada por la necesidad de articular las actividades y fomentar la colaboración entre los diferentes actores del panorama nacional, tanto universitarios, del CSIC, de centros tecnológicos y empresas, cuyo nicho de actividad se relacione con esta temática, ya sea a nivel fundamental o aplicado. Sus objetivos se centran fundamentalmente en i) impulsar la colaboración científica entre dichos actores a nivel regional, nacional y europeo, ii) llevar a cabo actividades de formación de personal especializado, iii) actividades de difusión, e iv) intentar aportar soluciones a los problemas procedentes de diferentes ámbitos sociales dentro de esta temática. Para ello, el grupo especializado realizará su actividad dentro de la SOCIEMAT, aunque nace con la clara vocación de colaborar con otras sociedades afines, tales como la Sociedad Española de Vacío (ASEVA) en la organización de eventos, cursos, etc.

La gestación del grupo especializado CyTeS tuvo lugar en dos reuniones fundacionales que se celebraron en Madrid (31 enero-1 Febrero 2017) y en Barcelona (8 Marzo 2018), con una asistencia presencial de más de 200 investigadores y tecnólogos de diferentes grupos de investigación y empresas de toda España. En estas reuniones se presentaron las principales líneas de actividad investigadora de cada grupo, abarcando temáticas tanto aplicadas, e.g. desarrollo de recubrimientos funcionales, tribología, recubrimientos protectores, nuevas técnicas de síntesis y caracterización de superficies nanoestructuradas, como otras de tipo fundamental, e.g., nanoestructuras y propiedades o simulación. También, y entre todas las temáticas tratadas, la funcionalización de superficies mediante técnicas laser, en pequeña y grandes superficies, y el desarrollo de biomateriales ocuparon un capítulo central.

Con tan sólo pocos meses de vida, el grupo especializado CyTeS ha apoyado la realización de tres cursos relacionados con la ciencia y tecnología de superficies, el primero organizado por el programa de postgrado del CSIC sobre "*Preparación, Caracterización y Aplicaciones de Recubrimientos y Capas Delgadas*" que se impartirá en el Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM). Otro organizado por el grupo de Nuevos Materiales de la Universidad de Vigo, titulado "Biomateriales: del concepto a la clínica", y el curso de postgrado sobre "*Métodos Físicos de Análisis de Capas Finas y Superficies de Sólidos*" organizado por el Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla. Asimismo, el próximo mes de Julio tendrá lugar la primera reunión de carácter científico de CyTeS en el Congreso Nacional de Materiales (CNMAT 2018) que se celebrará en Salamanca, dentro del simposio "Ciencia e Ingeniería de Superficies para Aplicaciones Avanzadas".



*Logotipo del grupo especializado*

**Origen de CyTeS**

En las últimas décadas, los tratamientos de la superficie de los materiales han tenido un gran interés en nuestro país, sobre todo por sus amplias aplicaciones en la industria metalúrgica. De hecho, las empresas dedicadas a hacer recubrimientos, localizadas en su mayoría en el País Vasco y Cataluña, ya contaban entonces con el apoyo de diversos centros de investigación aplicada. En la década

de los 90 los problemas más acuciantes estaban asociados al aumento de la dureza de piezas metálicas, la reducción del desgaste y la resistencia a la corrosión, mejora de propiedades ópticas, etc. Los tratamientos más utilizados estaban basados en los procesos de modificación de la superficie de las piezas tratadas, bien sea mediante el depósito de capas delgadas por técnicas de convencionales de PVD o CVD, o en la modificación de la superficie mediante la difusión de especies (C, N, B, etc.) por efecto de la temperatura, plasmas o implantación iónica.

Posteriormente, surgió el desarrollo de nuevas técnicas de deposición de capas dando lugar a estructuras superficiales novedosas en forma de multicapas y nanocompuestos multifuncionales con aplicaciones en diversos campos (barreras térmicas, protección frente a la corrosión, capas aislantes y conductoras para captación de energía solar, lentes, etc.). Como consecuencia de ello, ya al inicio del 2000, se consolidaron diferentes grupos de investigación, tanto en centros académicos (universidades y CSIC) como en empresas y centros tecnológicos, con amplia experiencia y equipamiento para el tratamiento y modificación de superficies, participando en amplios programas de investigación de carácter nacional y europeo (acciones COST, Brite-Euram, Programas Marco de la UE, etc.).

El germen la actual Red CyTeS se puede cifrar en la participación conjunta de varios grupos de investigación durante los años 2007-2014, en dos amplios programas de investigación de carácter nacional: CONSOLIDER INGENIO 2010, y CENIT, convocados por el entonces Ministerio de Ciencia e Innovación y el Centro de Desarrollo Tecnológico e Industrial (CDTI). En el primero de estos programas, un consorcio de diferentes centros, liderado por el ICMM, desarrolló a lo largo de los años 2009-14 un amplio proyecto de investigación básica y aplicada, dirigido a la '*Funcionalización superficial de materiales con alto valor añadido*' (FUNCOAT). En este consorcio participaron 14 grupos académicos (universidades y centros del CSIC, junto con dos centros tecnológicos y el laboratorio clínico de un hospital). En paralelo, otro gran consorcio formado por empresas y la colaboración de centros tecnológicos y académicos desarrolló un amplio proyecto sobre los '*Avances en recubrimientos tecnológicos para aplicaciones decorativas*' (ART-DECO) de carácter más aplicado. El proyecto fue liderado por la empresa ceramista TORRECID y gestionado ante el CDTI por la Asociación de la Industria Navarra (AIN).

### Reuniones Fundacionales

Obviamente, la participación en estos proyectos dio lugar a la celebración de numerosos encuentros, seminarios, talleres de trabajo y otros eventos, además de gran número de publicaciones conjuntas sobre el desarrollo de nuevos materiales y procesos relacionados con la modificación superficial. Con el fin de mantener estas actividades conjuntas de investigación, a finales del 2015 se creó la Red FUNCOAT+ con la ayuda del actual Ministerio de Economía y Comercio. El objetivo fundamental la Red era

“aglutinar y estructurar a grupos de investigación de prestigio internacional en el campo de la ciencia y tecnología de superficies a fin de contribuir a su desarrollo, tanto fundamental como aplicado, y servir de nexo entre la industria española y las instituciones científicas de vanguardia en nuestro país que realizan su investigación en ese campo”.



*Imagen de la primera reunión de CyTeS, que tuvo lugar en el Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid el 31 de Enero y 1 de Febrero de 2017*

La primera reunión de FUNCOAT+ tuvo lugar en el año 2016, en el Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas (CENIM) en Madrid. Posteriormente, el 31 de enero y 1 de febrero de 2017 se organizó una reunión con presencia de más un centenar de investigadores y empresas de toda España para que éstos diesen a conocer sus actividades científicas y líneas de investigación. Las presentaciones que se hicieron, incluyeron una gran variedad de temáticas, relacionadas fundamentalmente con el tratamiento de superficies y sus aplicaciones en diferentes campos de la tecnología, incluyendo los procesos de preparación y caracterización mediante técnicas avanzadas.

Esta misma reunión fue aprovechada para sentar las bases de una nueva Red estable con un horizonte más amplio, que pudiera integrar a los numerosos grupos de nuestro país (académicos, tecnológicos e industriales) interesados no solo en la funcionalización de superficies sino también en lo que se ha venido a denominar “*Ciencia y Tecnología de Superficies*”. Con objeto de disponer de una estructura organizativa eficiente para la celebración de reuniones científicas y otros eventos de difusión, en esta reunión se acordó la integración de la ya denominada Red CyTeS en la SOCIEMAT, funcionando como grupo especializado independiente.

En una segunda reunión, celebrada en una sola jornada en la Universidad de Barcelona, el 8 de marzo del 2018, se dieron cita de nuevo representantes de pequeñas y medianas empresas, centros tecnológicos y centros de investigación y universidades, todos ellos especialistas en el campo de recubrimientos en España. Dada su proximidad se concentró un número importante de representantes del área de Cataluña, aunque se mantuvo una importante representación de centros de todo el panorama nacional. La jornada se dividió en dos sesiones. En la sesión matinal se llevó a cabo un importante número de charlas de empresas muy reconocidas (Flubetec, Metal Estalki, Wis-

mok, Nano4Energy, CTECHnano, Advanced Nano-technologies, Future Chromes), dedicadas al depósito de recubrimientos duros protectores en herramientas de corte o moldes de inyección, recubrimientos decorativos, hidrofóbicos y otras aplicaciones funcionales. Se describieron diferentes procesos de depósito utilizando técnicas de sputtering magnetrón clásico y pulsado, deposición por arco catódico, o técnicas en fase vapor como *Atomic Layer Deposition*. La sesión continuó con representantes de centros tecnológicos (CTM, Tecnalia) así como del ámbito de investigación y académico (CIEMAT, INTA, CPT-UB, ICMM, Univ. de Vigo, ICMA, ICMAB, Univ. Granada, ICN2, UB) donde se mostraron los últimos avances científico-tecnológicos, como por ejemplo, para el tratamiento de aceros para su uso en condiciones extremas (muy alta temperatura en reactores nucleares, o para la reducción de la formación de hielo en la industria aeronáutica). Algunas de las presentaciones se centraron en materiales para aplicaciones biológicas (típicamente biocidas para su uso en implantes) o en aplicaciones de óxidos funcionales tanto en la electrónica como en la tecnología fotovoltaica.



Imagen de los investigadores que acudieron a la segunda reunión fundacional de CyTeS el pasado 8 de Marzo en Barcelona.

Una de las charlas se dedicó exclusivamente a ofrecer una visión resumida de los diferentes grupos de investigación agrupados en la Red FUNCOAT+, y de sus proyectos de colaboración más representativos, llevados a cabo durante los últimos años. Debido al gran número de asistentes que no pudieron participar en el programa de presentaciones orales, se brindó la posibilidad de realizar presentaciones de poster (unas 15) que completaron un amplio espectro de nuevos materiales y tecnologías de capa delgada, recubrimientos, o tratamiento de superficies. Durante las diferentes presentaciones se fueron analizando las sinergias entre los grupos asistentes, así como posibilidades de colaboración a corto y medio plazo. De esta manera se fue constatando el interés por la consolidación de un grupo especializado en tecnología de superficies con una amplia participación de los sectores industrial, tecnológico y científico. La jornada concluyó con una revisión de las conclusiones generales de las presentaciones, habiéndose cumplido el objetivo de fomentar las relaciones entre investigación y empresa en este sector creciente de recubrimientos funcionales, y con una

propuesta en firme de los estatutos para la constitución y funcionamiento del citado grupo especializado.

### Estatutos y funcionamiento.

En la última reunión en Barcelona se aprobaron los estatutos de funcionamiento del grupo especializado CyTeS como herramienta de organización interna dentro de la SOCIEMAT. En estos estatutos, además de proponer los objetivos comentados anteriormente, se definían diferentes roles y comisiones para articular su actividad. Como órgano principal se estableció una Comisión Delegada encargada de proponer, coordinar y dirigir todas las actividades, con un Coordinador General y un número variable de vocales, donde al menos uno de ellos debería pertenecer también a un órgano directivo de la ASEVA, propiciando así una mejor coordinación entre ambas entidades. Además, se crearon diversas comisiones de trabajo con diferentes objetivos, tales como la Comisión de Divulgación, de Actividades de Colaboración, de Actividades Formativas o de Organización de Eventos.

Se propuso que la elección de los miembros de la Comisión Delegada fuera por votación electrónica mediante una aplicación web especialmente designada para este propósito. Esta Comisión Delegada se encargará de nombrar los diferentes grupos de trabajo, en una legislatura máxima de 4 años. Además, y como norma transitoria y fundacional, se aprobó una Comisión Delegada transitoria durante los dos primeros años de vida, tras los cuales, se abriría el primer proceso electoral. Se nombró así a Agustín R. González-Elípe, Profesor de Investigación del CSIC en el Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla, como Coordinador General, y como vocales a Isabel Montero Herrero (Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid), Jaume Caro Prados (Fundación Centro Tecnológico de Manresa), Ibon Azkona (Metal Stalki), Gonzalo García Fuentes (Asociación de la Industria Navarra) y Alberto Palmero Acebedo (Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla).

### Actividades de CyTeS en CNMAT2018

Los próximos días 4, 5 y 6 de Julio tendrá lugar el “XV Congreso Nacional de Materiales”, y la “I Iberian Meeting on Materials Science” en Salamanca, organizado por la SOCIEMAT, la Sociedad Portuguesa de Materiales y la Universidad de Salamanca. En este congreso habrá un simposio específico para las actividades de CyTeS titulado “Ciencia e Ingeniería de Superficies para Aplicaciones Avanzadas”, que ha recibido más de 70 comunicaciones. En dicho simposio, no sólo se hará una presentación general sobre CyTeS por parte de su Coordinador General, sino que habrá una charla específica para llevar a cabo una iniciativa similar en Portugal. Desde un punto de vista científico, el simposio se dividirá en cinco sesiones diferentes de “Nanoestructuras y Propiedades”, “Biomateriales”, “Aplicaciones Disruptivas”, “Propiedades Tribológicas y Anticorrosión” y “Fabricación Avanzada”.



**Participar en las actividades de CyTeS**

Para ser miembro de CyTeS se requiere ser socio de SOCIEMAT (<http://www.sociemat.org>) y comunicarle a la organización el deseo de formar parte de CyTeS. Esto le garantizará acceso a todas las actividades, precios reducidos, posible colaboración en los diferentes grupos de trabajo, difusión de actividades, etc. También, se puede participar como simpatizante, para lo cual resulta necesario comunicárselo a algún miembro de la Comisión Delegada para incluirlo en las listas de correo informativas.

Más información en <http://sociemat.org/cytes/>.



# NORMAS DE PRESENTACION DE LA REVISTA “MATERIAL-ES”

A. Pérez<sup>1</sup>, M. Martínez<sup>1</sup>, J. López<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centro y dirección 1, antper@unizere.es

<sup>2</sup>Centro y dirección 2

**Resumen:** En el siguiente texto se presentan las normas para la presentación de los trabajos completos. (*El formato en el que se presenta el presente texto, sirve de orientación a la estructura del trabajo*). El no cumplimiento de estas directrices puede implicar la exclusión del trabajo en la revista.

**Palabras clave:** palabras clave que caractericen el contenido del artículo separadas por comas.

## 1. EXTENSIÓN.

Se admitirán trabajos completos de hasta 4 páginas (máximo) incluyendo todas las secciones, ajustándose al formato que se indica a continuación. Para su correcto procesamiento, el fichero resultante deberá tener un tamaño menor a 10 MB.

## 2. FORMATO GENERAL.

Los márgenes serán de 2 cm en todos los casos (superior, inferior, derecha e izquierda). El texto debe ajustarse a 2 columnas (Excepto el Título, Autores y Resumen), con espaciado entre columnas de 1cm. Se utilizará espaciado simple entre líneas de texto dejando una línea en blanco entre párrafos (sin sangrado), así como entre el encabezado de cada apartado y el texto.

Tipo de letra para el texto principal: Times New Roman 10.

## 3. TÍTULO.

Centrado la parte superior de la primera hoja sin dejar espacio. Letra: Times New Roman 12, mayúsculas y **negrita**.

## 4.- AUTORES.

El nombre de los autores constará centrado debajo del título, dejando una línea en blanco. Tipo de letra: Times New Roman 11 **negrita cursiva** y en minúsculas. Deberá subrayarse el nombre del autor que presenta el trabajo y la pertenencia a distintos centros se indicará con un superíndice detrás del nombre.

Tras una línea en blanco, se indicará la filiación de los autores. Debe hacerse constar la dirección de correo electrónico del ponente. La dirección de cada centro, en su caso, se incluirá en una línea diferente. Times New Roman 11.

## 5.- RESUMEN.

No excederá las 150 palabras en la versión castellano. Se colocará debajo de los autores tras 4 líneas en blanco. El texto principal a doble columna comenzará tras dos líneas en blanco de las palabras clave.

## 6.- ENCABEZADOS.

Los encabezamientos de los distintos apartados se mecanografiarán en mayúsculas y en negrita y serán numerados correlativamente. Los subencabezados, en su caso, deberán ir en minúsculas y subrayados.

## 7.- ECUACIONES Y FÓRMULAS.

Se recomienda mecanografiar las fórmulas dejando una línea en blanco antes y después de las mismas y consignando su número de referencia entre paréntesis en el margen derecho.

## 8.- FIGURAS Y TABLAS.

Las figuras aparecerán insertadas en el lugar del texto que les corresponda.

Como norma general, las tablas y figuras deberán ocupar el ancho de columna, aunque en caso necesario pueden prepararse para abarcar el ancho de hoja. Las figuras, a las que se hará referencia en el texto, aparecerán numeradas correlativamente y con un pie de figura que tendrá la estructura que se muestra en el siguiente ejemplo:

**Figura 1.** Sección longitudinal del pliegue 2 A. Pliegue en la parte interna del codo. 2,4x.

Las tablas tendrán el mismo tipo de letra que el texto, anteponiendo a cada tabla el número y título correspondiente en la forma que se indica:

**Tabla 1.** Composición química de los aceros.

## 9.- REFERENCIAS

Se citarán en el texto con el número correspondiente entre corchetes: [1]. Aparecerán agrupadas en la última sección. Las referencias se numerarán correlativamente en el orden que aparecen en el texto, con la forma siguiente:

[1] Kamdar, M. H., “Embrittlement by Liquid and Solid Metals”, Ed. The Metallurgical Society, 1984.

# SCIENTIFIC JOURNAL "MATERIAL-ES" GUIDELINES FOR PRESENTATION

A. Pérez<sup>1</sup>, M. Martínez<sup>1</sup>, J. López<sup>2</sup>

1 Group and address 1, antper@unizere.es

2 Group and address 2

**Summary:** In the following text are described the guidelines for presenting complete works. (*The format in which this text is presented, serves as an orientation of the work structure*). Failure to comply these guidelines may involve the exclusion of the work from the magazine.

**Keywords:** keywords that characterize the article content separated by commas.

## 1. EXTENSION.

Full papers of up to 4 pages (maximum) including all sections will be accepted, according format to these rules. For a correct processing, the resulting file size must be less than 10 MB.

## 2. GENERAL FORMAT.

The margins will be 2 cm in all cases (upper, lower, right and left). The text must be adjusted to 2 columns (except the Title, Authors and Summary), with 1 cm. spacing between columns. Simple spacing will be used between lines of text leaving a blank line between paragraphs (without bleed), as well as between the heading of each section and the text.

Main text formatted in Times New Roman font size 10.

## 3. TITLE.

At the top of the first sheet, centered without leaving space. Times New Roman font size 12, caps and **bold**.

## 4. AUTHORS.

The name of the authors will be centered below the title, leaving a blank line. Times New Roman font size 11 **bold, italics and lowercase**. The name of the author presenting the work should be underlined, and membership in different groups will be indicated by a superscript after the name.

After a blank line, the authors affiliation will be indicated. The rapporteur's e-mail address must be included. Each center's address, if so, will be included in a different line, Times New Roman font size 11.

## 5. SUMMARY.

It will not exceed 150 words in the English version. It will be placed below the authors after 4 blank lines. The main text in double column will begin after the keywords and two blank lines.

## 6. HEADINGS.

Different sections headings will be typed in **CAPITAL LETTERS, BOLD** and will be numbered correlatively. Subheadings, if applicable, should be lowercase and underlined.

## 7. EQUATIONS AND FORMULAS.

It is recommended to type the formulas leaving a blank line before and after them and entering their reference number in parentheses in the right margin.

## 8. FIGURES AND TABLES.

The figures will appear inserted in the corresponding place of the text.

As a general rule, tables and figures should occupy the column width, although if necessary they can be prepared to cover all the sheet width. The figures, to which reference will be made in the text, will appear numbered correlatively and with a figure foot that will have the structure shown in the following example:

**Figure 1.** Longitudinal section of the fold 2 A. Fold in the inner elbow side. 2,4x.

The tables will have the same format as the text, placing the corresponding number and title before each table as shown:

**Table 1.** Chemical composition of steels.

## 9. REFERENCES.

They will be cited in the text with the corresponding number in brackets: [1]. They will be presented grouped in the last section. The references will be numbered correlatively in the order they appear in the text, with the following form:

[1] Kamdar, M. H., "Embrittlement by Liquid and Solid Metals", Ed. The Metallurgical Society, 1984.