



1) NOMBRE DE CADA CURSO O ACTIVIDAD CURRICULAR

A) TERMODINÁMICA MOLECULAR

B) DATOS BÁSICOS DEL CURSO

Semestre	Horas de teoría por semana	Horas de práctica por semana	Horas trabajo adicional estudiante	Créditos
7 u 8	5	0	5	10

C) OBJETIVOS DEL CURSO

Objetivos generales	Al finalizar el curso el estudiante deberá tener una visión moderna e integrada de los conceptos y leyes fundamentales de la termodinámica clásica, la física estadística, y la termodinámica irreversible, así como de su uso en el estudio de las propiedades macroscópicas de los materiales desde una perspectiva molecular, con especial énfasis en su aplicación a materiales y sistemas biomoleculares. su aplicación a la descripción de los efectos de campos externos (eléctricos, gravitacionales, de confinamiento, etc.) sobre la estructura de un fluido y los solutos (moleculares, macromoleculares o coloidales) que contenga, y a la descripción de los procesos de difusión que ocurren en tales sistemas.	
Objetivos específicos	Unidades	Objetivo específico
	1. Propiedades y estados macroscópicos de los materiales.	Discutir las propiedades elementales (termodinámicas, estructurales, mecánicas, dinámicas y de transporte) de los materiales. Definir el equilibrio termodinámico y otros estados macroscópicos de los materiales. Ilustrar el concepto de modelos moleculares de las propiedades macroscópicas de los materiales.
	2. Termodinámica clásica.	Revisar los enunciados tradicionales de las leyes fundamentales de la termodinámica clásica e introducir el enfoque postulador. Discutir la naturaleza intrínsecamente probabilística e informática de la segunda ley de la termodinámica.
	3. Descripción termodinámica de un fluido inhomogéneo.	Introducir el concepto de perfil de densidad de masa y de energía de un fluido en presencia de campos externos. Relación fundamental y ecuaciones de estado de un fluido inhomogéneo.
	4. Descripción probabilística de los estados macroscópicos. Fluctuaciones térmicas.	Estados posibles, estados accesibles, distribución de probabilidad de los estados macroscópicos, valor medio y correlación de las fluctuaciones. Postulado de Boltzmann-Planck-Einstein. Aproximación gaussiana.
	5. Estructura de equilibrio de los líquidos.	Interacciones moleculares. Fluido de esferas duras. Aproximación de Percus-Yevick. Modelo primitivo y aproximación de Debye-Hückel. Doble capa eléctrica. Interacciones efectivas entre partículas en solución. Fuerzas de depleción.
	6. Fluctuaciones dependientes del tiempo y relajación al equilibrio.	Relajación macroscópica y fluctuaciones espontáneas. Ecuación de Langevin. Ecuación de difusión. Modelos estocásticos de las fluctuaciones dependientes del tiempo. Teoría de Onsager de la termodinámica irreversible.



	7. Hidrodinámica molecular.	Difusión y movimiento browniano de partículas interactuantes, Funciones de correlación dependientes del tiempo, Efectos de memoria, niveles de descripción y descripciones contraídas, Procesos estocásticos con memoria, Extensión de la teoría de Onsager de las fluctuaciones. Modelos moleculares de los procesos de relajación, Hidrodinámica molecular.
	8. Estados metaestables y dinámicamente arrestados.	Relajación irreversible hacia el estado de equilibrio, Estados de equilibrio estable, metaestable e inestable. Estados arrestados, Fenomenología de los vidrios y los geles.

D) CONTENIDOS Y MÉTODOS POR UNIDADES Y TEMAS

5h/semana, 16 semanas: 80 h/semestre

Unidad 1 Propiedades y estados macroscópicos de los materiales.		10 h
Tema 1.1 Energía interna, calor específico, módulos elásticos.		2 h
Tema 1.2 Propiedades dinámicas: coeficientes de fricción, de difusión, viscosidad, conductividad, etc.		2 h
Tema 1.3 Equilibrio termodinámico y sus condiciones. Ecuaciones térmica y mecánica de estado.		2 h
Tema 1.4 Gas ideal, sólido de Einstein y líquido de van der Waals.		1 h
Tema 1.5		2 h
Tema 1.6		1 h
Lecturas y otros recursos	Introducción a la termodinámica clásica. Leopoldo García-Colín Scherer. Trillas, 4ª edición. Thermodynamics and an introduction to thermostatics. Herbert B. Callen. John Wiley, New York.	
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado físico de cada uno de los conceptos nuevos	
Actividades de aprendizaje	Resolución de problemas tanto por parte del alumno como del maestro	

Unidad 2. Termodinámica clásica		10 h
Tema 2.1 Primera ley de la termodinámica: conservación de la energía.		2 h
Tema 2.2 Segunda ley de la termodinámica de acuerdo con Kelvin y de Clausius.		2 h
Tema 2.3 Postulados de Callen, relación termodinámica fundamental (RTF), ecuaciones de estado.		4 h
Tema 2.4 Interpretación probabilística de la segunda ley. Naturaleza informática de la segunda ley.		2 h
Lecturas y otros recursos	Introducción a la termodinámica clásica. Leopoldo García-Colín Scherer. Trillas, 4ª edición. Thermodynamics and an introduction to thermostatics. Herbert B. Callen. John Wiley, New York.	
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado físico de cada uno de los conceptos nuevos	
Actividades de aprendizaje	Resolución de problemas tanto por parte del alumno como del maestro	

Unidad 3. Descripción termodinámica de un fluido inhomogéneo.		10 h
Tema 3.1 Relación termodinámica fundamental y ecuaciones de estado de un fluido inhomogéneo.		3 h
Tema 3.2 Termodinámica no local. Condiciones de equilibrio.		2 h
Tema 3.3 Gas ideal inhomogéneo y fórmula barométrica.		1 h
Tema 3.4 Energía libre de un fluido inhomogéneo.		2 h
Tema 3.5 Aproximación de Debye-Hückel.		2 h
Lecturas y otros recursos	Thermodynamics and an introduction to thermostatics. Herbert B. Callen. John Wiley, New York y notas del curso.	
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado físico de cada uno de los conceptos nuevos. Experimentos demostrativos de los principios físicos relacionados con esta unidad	
Actividades de aprendizaje	Resolución de problemas tanto por parte del alumno como del maestro	



Unidad 4. Descripción probabilística de los estados macroscópicos. Fluctuaciones térmicas.		10 h
Tema 4.1 Estados posibles, estados accesibles, y su descripción probabilística.		2 h
Tema 4.2 Equilibrio termodinámico: condiciones de equilibrio y valores medios de las variables.		2 h
Tema 4.3 Fluctuaciones: covarianza y estabilidad del equilibrio. Funciones de correlación.		3 h
Tema 4.4 Postulado de Boltzmann-Planck-Einstein. Aproximación gaussiana.		3 h
Lecturas y otros recursos	Thermodynamics and an introduction to thermostatics. Herbert B. Callen. John Wiley, New York y notas del curso.	
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado físico de cada uno de los conceptos nuevos. Experimentos demostrativos de los principios físicos relacionados con esta unidad	
Actividades de aprendizaje	Resolución de problemas tanto por parte del alumno como del maestro	

Unidad 5. Estructura de equilibrio de los líquidos.		10 h
Tema 5.1 Interacciones moleculares. Fuerzas de van der Waals, electrostáticas, de esfera dura.		2 h
Tema 5.2 Estructura del fluido de esferas duras y su aproximación de Percus-Yevick.		3 h
Tema 5.3 Aproximación de Debye-Hückel y teoría de la doble capa eléctrica.		3 h
Tema 5.4 Interacciones efectivas entre partículas en solución. Fuerzas de depleción.		2 h
Lecturas y otros recursos	Theory of Simple Liquids, J. P. Hansen and I. R. McDonald, (Academic Press Inc., 1976) y notas del curso.	
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado físico de cada uno de los conceptos nuevos	
Actividades de aprendizaje	Resolución de problemas tanto por parte del alumno como del maestro	

Unidad 6. Fluctuaciones dependientes del tiempo y relajación al equilibrio.		10 h
Tema 6.1 Fenomenología de los procesos de relajación. Ecuaciones de transporte.		2 h
Tema 6.2 Leyes lineales de la termodinámica irreversible.		3 h
Tema 6.3 Movimiento browniano. Fluctuaciones dependientes del tiempo.		2 h
Tema 6.4 Modelos estocásticos y teoría de Onsager de las fluctuaciones.		3 h
Lecturas y otros recursos	Statistical thermodynamics of nonequilibrium processes. Joel Keizer. Springer, New York (1987) y notas del curso.	
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado físico de cada uno de los conceptos nuevos	
Actividades de aprendizaje	Resolución de problemas tanto por parte del alumno como del maestro	

Unidad 7. Hidrodinámica molecular		12 h
Tema 7.1 Difusión y movimiento browniano de partículas interactuantes.		2 h
Tema 7.2 Funciones de correlación dependientes del tiempo.		2 h
Tema 7.3 Efectos de memoria, niveles de descripción y descripciones contraídas.		2 h
Tema 7.4 Procesos estocásticos con memoria. Extensión de la teoría de Onsager de las fluctuaciones.		2 h
Tema 7.5 Modelos moleculares de los procesos de relajación.		2 h
Tema 7.6 Hidrodinámica molecular.		2 h
Lecturas y otros recursos	Statistical thermodynamics of nonequilibrium processes. Joel Keizer. Springer, New York (1987); Molecular Hydrodynamics, J. P. Boon and S. Yip, Dover, (1991); notas del curso.	
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado físico de cada uno de los conceptos nuevos. Experimentos demostrativos de los principios físicos relacionados con esta unidad	
Actividades de aprendizaje	Resolución de problemas tanto por parte del alumno como del maestro	



Unidad 8. Estados metaestables y dinámicamente arrestados.		8 h
Tema 8.1 Relajación irreversible hacia el estado de equilibrio.		2 h
Tema 8.2 Estados de equilibrio estable, metaestable e inestable. Estados arrestados.		3 h
Tema 8.3 Fenomenología de los vidrios y los geles.		3 h
Lecturas y otros recursos	Artículos de revisión y notas del curso.	
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado físico de cada uno de los conceptos nuevos. Experimentos demostrativos de los principios físicos relacionados con esta unidad	
Actividades de aprendizaje	Resolución de problemas tanto por parte del alumno como del maestro	

E) ESTRATEGIAS DE ENSEÑANZA Y APRENDIZAJE

- Exposición del maestro con apoyo de recursos visuales y audiovisuales
- Tareas previas y posteriores a cada tema
- Análisis de textos científicos y tecnológicos
- Evaluación de conceptos formales en exámenes parciales
- Evaluación de la capacidad de síntesis e integración del conocimiento mediante exámenes parciales

F) EVALUACIÓN Y ACREDITACIÓN

Elaboración y/o presentación	Periodicidad	Abarca	Ponderación
Primer examen parcial	1	Unidades 1 y 2	20%
Segundo examen parcial	1	Unidad 3 y 4	20%
Tercer examen parcial	1	Unidades 5 y 6	20%
Cuarto examen parcial	1	Unidad 7 y 8	20%
Examen ordinario	1	Unidades 1 a 8	20%
TOTAL			100%

G) BIBLIOGRAFÍA Y RECURSOS INFORMÁTICOS

Textos básicos

- Introducción a la termodinámica clásica. Leopoldo García-Colín Scherer. Trillas, 4^a edición (1990).
- Thermodynamics and an introduction to thermostatics, second edition. Herbert B. Callen. John Wiley and sons, New York.
- Theory of Simple Liquids, J. P. Hansen and I. R. McDonald, (Academic Press Inc., 1976).
- Statistical thermodynamics of nonequilibrium processes. Joel Keizer. Springer-Verlag, New York (1987).
- Molecular Hydrodynamics, J. P. Boon and S. Yip, Dover, (1991).

Textos complementarios

- Termodinámica molecular. Notas del curso. M. Medina Noyola.
- Diversos artículos de revisión, de investigación y de divulgación.