9-10

# GUÍA DE ESTUDIO DE LDI



# TERMODIN. QUIMICA MOLECULAR

**CÓDIGO 01095369**

UNED

9-10

**TERMODIN. QUIMICA MOLECULAR**

**CÓDIGO 01095369**

# ÍNDICE

OBJETIVOS
CONTENIDOS
EQUIPO DOCENTE
BIBLIOGRAFÍA BÁSICA
BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA
SISTEMA DE EVALUACIÓN
HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

## OBJETIVOS

Se trata de un curso de Termodinámica Estadística específicamente destinado a estudiantes de Química. Se pretende con él rellenar el vacío entre la Teoría Cuántica y la Termodinámica, de modo que se facilite la comprensión del comportamiento de los sistemas macroscópicos en términos de sus partículas constituyentes.
Dentro de esta perspectiva se persiguen dos fines primarios. Describir ampliamente fundamentos y metodología. Exponer algunos temas de interés específicamente químico, tanto de los considerados clásicos como de otros que son objeto de investigación activa y se encuentran diseminados en revistas científicas y monografías especializadas.
Es muy importante reparar en que, dada la especialización de la asignatura, ésta posee un carácter eminentemente informativo. Por ello, la memorización de fórmulas y desarrollos matemáticos concretos, es secundaria. Es preferible fijarse con atención en lo que podría llamarse "la física" subyacente a las ecuaciones, es decir, su dimensionalidad, sentido, utilidad y todas aquellas características cualitativas que ayuden a interpretar el punto bajo estudio. Así mismo, es de gran valor establecer las conexiones entre los diferentes temas tratados para conseguir la visión global del conjunto.

## CONTENIDOS

Sólo hay dos Unidades Didácticas para esta asignatura (12 temas). Los prerrequisitos deseables para su estudio son:
-Conocimientos de Análisis Matemático, Álgebra y Teoría de Probabilidades a nivel de la Licenciatura. -Aunque no es imprescindible, puede ser de gran ayuda cursar previamente (1.er Cuatrimestre) la asignatura Métodos Teóricos de la Química Física.

**Temario**

**Unidad Didáctica I. Fundamentos**

TEMA 1. Descripción estadística de un sistema macroscópico.
TEMA 2. Formalismo de colectivos. Función de partición y propiedades termodinámicas.
TEMA 3. Funciones de distribución en el espacio fásico.
TEMA 4. Equilibrio y funciones de distribución clásicas.
TEMA 5. Estadística de fluctuaciones.
TEMA 6. La matriz densidad para sistemas cuánticos en equilibrio.

**Unidad Didáctica II. Aplicaciones**

TEMA 7. El gas real.
TEMA 8. Líquidos monoatómicos (clásicos) en equilibrio.
TEMA 9. Simulación Monte Carlo de líquidos moleculares.
TEMA 10. Simulación Monte Carlo de efectos cuánticos en líquidos.
TEMA 11. El modelo de red.
TEMA 12. Aplicación del modelo de red al estudio de disoluciones.

## EQUIPO DOCENTE

## BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13):9788436225778
Título:TERMODINÁMICA QUÍMICA MOLECULAR (1ª)
Autor/es:Sesé Sánchez, Luis M. ; Criado Sancho, Manuel ;
Editorial:U.N.E.D.

SESÉ, L. M. y CRIADO, M.: *Termodinámica Química Molecular (2 Volúmenes)* . UNED, 1990.

## BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Aunque de un nivel elevado, pueden ser de interés como obras de consulta:

BALESCU, R.: *Equilibrium and non-equilibrium statistical mechanics*. Wiley. Nueva York, 1975.
McQUARRIE, D. A.: *Statistical mechanics*. Harper and Row. Nueva York, 1976.

## SISTEMA DE EVALUACIÓN

**6.1. PRUEBAS DE EVALUACIÓN A DISTANCIA**

No se han previsto Pruebas de Evaluación a Distancia convencionales para esta asignatura. Se pretende englobar éstas y las prácticas en un mismo bloque de acuerdo al siguiente esquema. El alumno podrá realizar en su domicilio hasta un máximo de dos trabajos. Uno de ellos es de carácter **obligatorio** y consistirá en la preparación de una prueba de ensayo, de extensión inicial no superior a 20 páginas DIN-A4 mecanografiadas a doble espacio, sobre los objetivos y métodos de la Termodinámica Estadística. Nótese que no se pide confeccionar un manual de fórmulas, sino plasmar en palabras (técnicas) las conclusiones extraídas de una **lectura** detenida del texto.

El segundo trabajo es de carácter **opcional** y se podrá elegir entre:

a) El comentario de artículos de investigación sobre puntos del temario que encuentre especialmente interesantes o a convenir.

b) La realización de una serie de ejercicios representativos de un Tema concreto o de toda la Asignatura. No sería necesario, en este caso, conocer ni utilizar técnicas de programación de computadores.

c) La realización de cálculos de nivel intermedio sobre problemas concretos del temario, requiriéndose en este caso tener acceso a facilidades de cálculo (ordenador personal o similar) y conocimientos de programación (BASIC o FORTRAN).

Se le facilitará para ello toda la documentación oportuna así como el apoyo necesario por parte del Profesor de la Sede Central.

**NOTA IMPORTANTE**

Estas actividades constituirán un 70 por 100 de la calificación final. Concluidas éstas se remitirán al Profesor encargado de la asignatura para su revisión, proceso que continuará hasta garantizar la mínima comprensión aceptable de la materia. La no realización del trabajo **obligatorio** implicará la no superación de la Asignatura.

**6.2. PRUEBAS PRESENCIALES**

La Prueba Presencial es de carácter **obligatorio** y se orientará a medir la comprensión global alcanzada en la asignatura. Consistirá en varias cuestiones de respuesta razonada que pueden involucrar la realización de algún cálculo. Será necesario entonces disponer de calculadora de sobremesa y **no** se permitirá el uso de cualquier otro material auxiliar. Las puntuaciones de cada apartado aparecerán reflejadas en el modelo de examen y la duración de éste será de **una única** sesión de dos horas.

**6.3. CRITERIOS GENERALES PARA LA EVALUACIÓN FINAL**

La calificación final será la media ponderada entre (PED + PRÁCTICAS) y la PRUEBA PRESENCIAL.

## HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

Lunes, de 16.00 a 20.00 horas. Tel.: 91 398 73 87. Despacho: 321, Facultad de Ciencias, Paseo Senda del Rey 9, 28040 Madrid.

**NOTA IMPORTANTE**

Una vez matriculado, el alumno deberá enviar cuanto antes una de las fichas que encontrará en el apartado dedicado a la INFORMACIÓN GENERAL del Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas.

**ANEXO ADQUISICIÓN DE MATERIAL DIDÁCTICO**

El material didáctico, tanto impreso (libros, addendas, guías didácticas, pruebas de evaluación, programas...) como audiovisual (vídeos, casetes) y multimedia, editado por la UNED puede ser adquirido del siguiente modo:

**VENTA DIRECTA**

Para adquirir directamente el material didáctico editado por la UNED, el alumno puede hacerlo en los siguientes puntos de venta:

a) Librería de la UNED
C/ Bravo Murillo, 38 (Planta baja)
28015 Madrid
Paseo Senda del Rey, n.° 5 (Edificio Biblioteca)28040 Madrid
b) Librerías de los Centros Asociados.
c) Distribuidores autorizados.

**CONTRA REEMBOLSO**

Además, el material didáctico, impreso, audiovisual y multimedia, editado por la UNED puede ser adquirido contra reembolso, solicitándolo a la Librería de la UNED. La petición de material se puede realizar:

*a)* Por correo ordinario a la siguiente dirección:
Librería de la UNED
C/ Bravo Murillo, 38

28015 Madrid
*b)* Por teléfono: 91 398 75 6091 398 74 58*c)* Por fax: 91 398 75 27
*d)*Por correo electrónico: Consultar la página de la UNED en Internet, cuya dirección es: *www.uned.es*
Igualmente es posible que algunos Centros Asociados y Distribuidores autorizados dispongan del servicio de contrarreembolso.
Es conveniente recordar que no debe enviarse dinero al realizar el pedido.

**MATERIAL DIDÁCTICO**

El alumno debe consultar en la Guía del Curso el material didáctico que precisa para la correcta preparación de las asignaturas de las que se ha matriculado.
Debe comprobar si la preparación de cada asignatura necesita:
- Unidades Didácticas. - Guías Didácticas. - Addendas.-Pruebas de Evaluación.-Programas. Fe de Erratas. - Libros recomendados.- Vídeos.- Casetes. - Material multimedia. - Otros materiales. - Curso Virtual.

En el caso de libros recomendados o libros que sustituyen a las Unidades Didácticas y que no están editados por la UNED, podrán adquirirse en cualquier librería. No obstante, se aconseja consultar al profesor encargado de la asignatura.
Para pedidos contrarreembolso, enviar a:
Librería UNED
Bravo Murillo, 38. 28015 MADRID

Nombre y Apellidos:

Domicilio:

CP: Ciudad: País:

Tel.: / CIF/NIF:

| CÓDIGO | TÍTULO | CANTIDAD |
|---|---|---|

Fecha y Firma

---

## IGUALDAD DE GÉNERO

En coherencia con el valor asumido de la igualdad de género, todas las denominaciones que en esta Guía hacen referencia a órganos de gobierno unipersonales, de representación, o miembros de la comunidad universitaria y se efectúan en género masculino, cuando no se hayan sustituido por términos genéricos, se entenderán hechas indistintamente en género femenino o masculino, según el sexo del titular que los desempeñe.