

INDICE

<i>Introducción</i>	15
 Tema 1. INTRODUCCIÓN A LA MATERIA CONDENSADA	21
1. Introducción.....	23
1.1. Objetivos.....	24
1.2. Sólidos, líquidos y otras fases condensadas.....	24
2. Interacciones moleculares y materia condensada	32
2.1. Relación estructura-potencial intermolecular	36
2.2. Aproximación de aditividad del potencial intermo- lecular	39
3. Potenciales de interacción aproximados.....	42
3.1. Relación estructura-potencial intermolecular	50
4. Determinación del factor de estructura	54
5. Ejercicios de autoevaluación.....	60
6. Otros ejercicios.....	61
7. Bibliografía	61
8. Respuestas a los ejercicios de autoevaluación.....	62
 Tema 2. LÍQUIDOS	65
1. Introducción	67
1.1. Objetivos.....	67

2. Descripción fenomenológica de los líquidos	68
2.1. Propiedades Termodinámicas de Líquidos: Ecuaciones de Estado.....	68
2.2. Determinación de la estructura de los líquidos	70
2.3. Comportamiento fluido de los líquidos y transición vítrea	71
3. Teorías del estado líquido (propiedades de equilibrio)	73
3.1. El Teorema del virial de Clausius y la ecuación de estado.....	73
3.2. Teorías basadas en la función de distribución	75
4. Introducción a los métodos de simulación en ordenador	79
4.1. Método de Monte Carlo	79
4.2. Método de la dinámica molecular	81
5. Estructura de líquidos simples	82
6. Ejercicios de autoevaluación.....	84
7. Otros ejercicios	84
8. Bibliografía	85
9. Respuestas a los ejercicios de autoevaluación.....	86
 Tema 3. SÓLIDOS. ESTRUCTURA CRISTALINA	89
1. Introducción	91
1.1. Objetivos.....	91
2. Redes cristalinas.....	91
2.1. Planos cristalográficos. Índices de Miller	97
3. Técnicas de difracción	101
3.1. Condiciones de Laue	101

3.2. Ley de Bragg	102
4. Métodos Experimentales de Difracción	105
4.1. Espectro de rayos-X	105
4.2. Método de Laue	106
4.3. Difractómetro de monocristales	107
4.4. Técnicas de polvo cristalino	108
4.5 Difractómetro de polvo	110
5. Factor de estructura en sólidos.....	112
5.1. Cálculo de factor de estructura	113
5.2. Factor de estructura de un cristal centrosimétrico	118
5.3. Extinciones o ausencias.....	119
6. Determinación de la densidad electrónica.....	119
6.1. Análisis de Fourier	120
6.2. Función de Patterson	121
6.3. Refinamiento de estructuras	122
7. Difracción de neutrones y electrones	122
7.1. Difracción de neutrones.....	123
7.2. Difracción de electrones	124
8. Estabilidad de un cristal y energía de cohesión	126
8.1. Sólidos moleculares	127
8.2. Cristales covalentes	131
9. Energías de cohesión en cristales iónicos y metálicos.....	133
9.1. Cristales iónicos.....	133
9.2. Cristales metálicos	141
10. Ejercicios de autoevaluación.....	141
11. Otros ejercicios.....	143

12. Bibliografía	144
13. Respuestas a los ejercicios de autoevaluación.....	145
 Tema 4. SÓLIDOS. PROPIEDADES FÍSICAS.....	149
1. Introducción	151
1.1. Objetivos.....	151
2. Propiedades Termodinámicas.....	151
3. Propiedades Mecánicas	156
4. Propiedades Eléctricas.....	159
5. Teoría de Sólidos. Propiedades Termodinámicas.....	159
5.1. Modelo de Dulong y Petit	160
5.2. Modelo de Einstein	161
5.3. Modelo de Debye	163
6. Teoría de Sólidos. Propiedades Electrónicas de los Metales	173
6.1. Teoría del electrón libre.....	173
6.2. Teoría de bandas	180
7. Ejercicios de autoevaluación.....	188
8. Otros ejercicios.....	189
9. Bibliografía	189
10. Respuestas a los ejercicios de autoevaluación.....	190
 Tema 5. POLÍMEROS	195
1. Introducción	197
1.1. Objetivos.....	197
2. Características generales y comportamiento mecánico	197

2.1. Composición química, definiciones generales y propiedades mecánicas.....	197
2.2. Características microscópicas de las moléculas de polímero	203
3. Macromoléculas naturales y biopolímeros.....	207
4. Distribución y valores promedio de los pesos moleculares..	211
5. Propiedades conformacionales	213
6. Técnicas de caracterización	217
6.1. Presión osmótica	217
6.2. Dispersión de luz	218
6.3. Coeficientes de difusión y sedimentación.....	220
6.4. Viscosidad	221
6.5. Cromatografía.....	223
7. Ejercicios de autoevaluación.....	224
8. Otros ejercicios.....	225
9. Bibliografía	226
10. Respuestas a los ejercicios de autoevaluación.....	226
 Tema 6. CRISTALES LÍQUIDOS.....	 229
1. Introducción	231
1.1. Objetivos.....	231
2. El concepto de cristal líquido.....	231
2.1. Cristales líquidos termotrópicos	234
2.2. Cristales líquidos liotrópicos	238
3. Organización en los cristales líquidos	242
4. Caracterización de los cristales líquidos	246

5. Aplicaciones de los cristales líquidos	250
6. Ejercicios de autoevaluación.....	253
7. Otros ejercicios.....	255
8. Bibliografía	256
9. Respuestas a los ejercicios de autoevaluación.....	256
 Tema 7. INTERFASES Y SUPERFICIES	259
1. Introducción	261
1.1. Objetivos.....	262
2. La superficie divisoria de Gibbs.....	262
3. Tensión superficial.....	263
3.1. Adhesión y cohesión.....	271
3.2. Interfases curvas y capilaridad.....	273
3.3. Ecuación de Young	278
4. Isotermas de adsorción de Gibbs y de Langmuir.....	281
4.1. Tratamiento de Gibbs	281
4.2. Isoterma de Langmuir	286
5. Ejercicios de autoevaluación.....	290
6. Otros ejercicios.....	292
7. Bibliografía	293
8. Respuestas a los ejercicios de autoevaluación.....	294
 Tema 8. AGREGADOS MOLECULARES.....	297
1. Introducción	299
1.1. Objetivos.....	299
2. Micelas y microemulsiones	300

3. Monocapas de Gibbs y monocapas de Langmuir	305
4. Multicapas Langmuir-Blodgett.....	310
5. Coloides.....	312
5.1. Teoría DLVO.....	315
6. Ejercicios de autoevaluación.....	318
7. Otros ejercicios.....	320
8. Bibliografía	321
9. Respuestas a los ejercicios de autoevaluación.....	321
 Tema 9. ADSORCIÓN Y CATÁLISIS.....	325
1. Introducción	327
1.1. Objetivos.....	327
2. Quimisorción y fisorción	327
3. La interfase sólido–gas.....	331
3.1. Tipos de isothermas de adsorción.....	332
3.2. Adsorción de una monocapa.....	335
3.3. Adsorción en Multicapas	345
4. La interfase sólido–disolución	352
5. Catálisis con sólidos.....	354
6. Ejercicios de autoevaluación.....	358
7. Otros ejercicios.....	359
8. Bibliografía	360
9. Respuestas a los ejercicios de autoevaluación.....	361

Tema 7

Interfases y superficies

1. Introducción
 - 1.1. Objetivos
2. La superficie divisoria de Gibbs
3. Tensión superficial
 - 3.1. Adhesión y cohesión.
 - 3.2. Interfases curvas y capilaridad
 - 3.3. Ecuación de Young.
4. Isotermas de adsorción de Gibbs y de Langmuir
 - 4.1. Tratamiento de Gibbs
 - 4.2. Isoterma de Langmuir
5. Ejercicios de autoevaluación
6. Otros ejercicios
7. Bibliografía
8. Respuestas a los ejercicios de autoevaluación

TEMA 7

INTERFASES Y SUPERFICIES

1. INTRODUCCIÓN

Cuando se estudian los diferentes estados o fases de la materia se supone que sus propiedades se repiten en cualquier punto de su volumen. Sin embargo, las fases no se encuentran aisladas entre sí; siempre presentan una o varias regiones fronterizas que se denominan interfases. El término superficie se emplea para designar las interfases sólido – gas y líquido – gas. Por ejemplo, si se observa un vaso con agua y aceite, se pueden encontrar en él cinco interfases distintas:

- una líquido– líquido (aceite – agua),
- dos sólido – líquido (vidrio – agua y vidrio – aceite),
- una superficie líquido – gas (aceite – aire) y
- una superficie sólido – gas (vidrio – aire).

La lista de las interfases simples que se encuentran en la naturaleza se completa con la interfase sólido – sólido.

Las propiedades de las fases pueden variar al acercarse a la interfase de separación. Sin embargo, la relación superficie/volumen es muy pequeña en la mayor parte de los sistemas, por tanto, para su estudio, se supone que se pueden desestimar los efectos fronterizos. No obstante existen numerosas ocasiones donde esto no sucede. Estos casos ocurren, tanto en aplicaciones industriales, como en la naturaleza. Entre los primeros se incluyen procesos de adhesión, en recubrimientos de superficies, reacciones químicas en superficies, etc. En el segundo caso se encuentran también muchos ejemplos, como en una burbuja de gas en el interior de un líquido, o una gota de líquido contenida en otro inmiscible con él, además, se pueden observar en numerosos procesos de

los seres vivos como la respiración, el transporte a través de membranas, etcétera.

1.1. Objetivos

En este tema se introducen algunos términos y procesos relacionados con las regiones fronterizas entre dos fases diferentes siendo al menos una de ellas condensada. Al final del tema se debe conocer:

- Qué se entiende por tensión superficial
- La diferencia entre adhesión y cohesión
- Los procesos capilaridad y el término de mojado
- Como se puede relacionar la concentración de un componente en una interfase y la tensión superficial

2. LA SUPERFICIE DIVISORIA DE GIBBS

En las regiones fronterizas entre fases se produce un cambio importante en la composición en la dirección perpendicular a las interfases. Así, en la interfase que forma un líquido con su gas, la variación de la densidad, si nos movemos desde el interior de la fase líquida hacia el gas, tiene generalmente la forma mostrada, con una línea continua, en la figura 7.1. Se observa que presenta una región w en la que la densidad, $\rho(z)$, varía de forma continua entre la correspondiente del líquido, ρ_l , y la del gas, ρ_g en la dirección z ; la función más sencilla que puede describir este cambio es una función escalón, $\rho_d(z)$, como la representada por una línea de puntos en la figura 7.1.

La interfase idealizada bidimensional propuesta define el volumen total del sistema, V , como la suma de los volúmenes de las fases macroscópicas, V_g y V_l , $V = V_g + V_l$, lo que, como se verá más adelante, es muy útil en el tratamiento termodinámico a pesar de que en un sistema real lo que se entiende como interfase tiene un espesor finito que es del orden de varios diámetros moleculares.