

TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA Y DE NO- EQUILIBRIO

Curso 2012/2013

(Código:21151111)

1.PRESENTACIÓN

Esta Asignatura pertenece al Postgrado en Química, está ubicada en el segundo Semestre y es de carácter optativo. Tiene asignados 6 créditos ECTS (150 horas de trabajo). Los objetivos generales son los de conocer y saber aplicar determinadas herramientas conceptuales básicas que son de uso común en el estudio de las fases de la materia, prestando una especial atención a la materia condensada. Los prerequisites para cursar esta asignatura son los de haber cursado las asignaturas de Matemáticas previas existentes en los estudios de Grado, así como las de Termodinámica Clásica y de Química Física. El aprendizaje está orientado a la realización de trabajos de curso (dos trabajos de curso obligatorios con evaluación continua) y un examen (obligatorio).

2.CONTEXTUALIZACIÓN

Esta Asignatura tiene que ver con dos aspectos que se presentan cuando se estudian sistemas compuestos por muchas partículas (del orden del número de Avogadro) desde un punto de vista microscópico. Por un lado están los sistemas en equilibrio (Mecánica Estadística del Equilibrio), para los que una descripción estadística independiente del origen de tiempos es suficiente, y por el otro están los sistemas en evolución fuera del equilibrio (Termodinámica del No Equilibrio), que necesitan de consideraciones dinámicas para su estudio. Hasta este momento de los estudios de Postgrado el estudiante ha debido estudiar las dos disciplinas básicas sobre las que se asienta el estudio de la Química: la Termodinámica Clásica y la Mecánica Cuántica de átomos y moléculas. La Termodinámica, a través de sus tres principios y sin hacer referencia a la naturaleza atómico-molecular de la materia, contacta con las características energéticas y térmicas de los sistemas macroscópicos. En el otro extremo, el microscópico, está la Mecánica Cuántica que nos permite explicar el comportamiento y propiedades individuales de átomos y moléculas. Hay pues aquí en la formación del estudiante de Química un vacío entre ambas modalidades descriptivas que esta Asignatura contribuye a rellenar, pues la Mecánica Estadística suministra tratamientos y métodos que explican las propiedades de los sistemas macroscópicos en términos de las características de sus partículas componentes. El estudio presente de las técnicas de la Mecánica Estadística de equilibrio muestra al estudiante cómo, a partir de unos principios muy generales relativos a la naturaleza de los sistemas con un número muy grande de grados de libertad, pueden efectuarse estas conexiones para estudiar sistemas de interés como son los gases, los líquidos y los sólidos. La complejidad de los sistemas estudiados no pasará de los sistemas monoatómicos puros.

Uno de los aspectos más llamativos de la Termodinámica de equilibrio es que describe al sistema por medio de propiedades que son independientes de la posición y del tiempo; es decir: homogéneas, isotrópicas y estacionarias. Por supuesto, tal descripción se limita a los estados de equilibrio, de tal modo que se limita a al estudio de los cambios que experimentan las magnitudes al pasar de un estado a otro.

Sin embargo, los fenómenos que se observan en la Naturaleza (reacciones químicas, procesos de morfogénesis, etc.) presentan una direccionalidad espontánea bien definida (irreversibilidad) que difícilmente encaja con el concepto de equilibrio; por ello, en tales situaciones el interés se centra en la evolución del sistema, es decir, en el proceso y no en el estado, lo cual implica conocer el valor de las propiedades del sistema en todo instante y en cada punto del espacio; formalmente, lo anterior requiere la consideración de variables de campo, dependientes de la posición y del tiempo.

El estudio de la Termodinámica de procesos irreversibles se lleva a cabo de acuerdo con dos modelos, el primero de ellos la aproximación lineal clásica, basada en la hipótesis de equilibrio local y en las ecuaciones constitutivas lineales y el segundo



el modelo de Termodinámica extendida (EIT), basada en la incorporación de los flujos disipativos existentes en el sistema (flujo de calor, transporte de materia, presión viscosa, etc.) como variables independientes y en la existencia de una entropía generalizada función analítica de las variables clásicas (energía interna, volumen y composición) y del conjunto de flujos disipativos.

El hecho de considerar el sistema continuo requiere efectuar un estudio básico de la Mecánica de medios continuos, introduciendo tensores de deformación y considerando diferentes derivadas temporales (euleriana, lagrangina, convectivas, etc.). Para ello, es necesario disponer de las herramientas matemáticas adecuadas; en el curso se hace especial énfasis en el estudio general de los sistemas de coordenadas curvilíneas (tanto ortogonales, como no ortogonales), teniendo como objetivo fundamental el manejo de operadores diferenciales.

Aunque es cierto que el nivel de profundidad al que se debería llegar en estos temas tendría que ser siempre el máximo posible, no es menos cierto que las limitaciones de tiempo imponen severas restricciones a este deseo. Por consiguiente, en esta Asignatura se darán una serie de ideas fundamentales sobre determinados temas útiles, prestando especial atención al carácter práctico y aplicado de los conocimientos a asimilar. De este modo las complejidades matemáticas formales (teoremas y demostraciones rigurosas) pueden perfectamente formar parte de una segunda lectura detenida sobre esta materia, no siendo en la mayor parte de los casos objetivos centrales del presente estudio. Esta formación inicial se espera que pueda servir de base para que los estudiantes interesados en proseguir en esta línea puedan acometer estudios más avanzados sobre temas de materia condensada con posterioridad. No debe el estudiante perder de vista el carácter estadístico de esta disciplina, lo que la dota de una complejidad adicional por tener que hacer referencia obligada a conceptos generales de esta rama de la Matemática. Es muy importante tener en cuenta que esta disciplina es objeto actualmente de investigación activa y que tiene importantes aplicaciones en lo que se denomina materia condensada (¿soft condensed matter?), tanto para la comprensión de las propiedades (clásicas y cuánticas) de los sistemas macroscópicos, como para las aplicaciones en el diseño de nuevos materiales. Dado que es la primera vez que se toma contacto con ella, este curso es de un carácter eminentemente conceptual. De especial trascendencia para el estudiante de estos temas es la utilización del cálculo con computador, si bien, por razones obvias de tiempo, en este curso introductorio el nivel de sofisticación no pasará del cálculo manual o con calculadora de escritorio. Esto responde a la experiencia contrastada de que solamente después de saber cómo se resuelve un problema ¿a mano? es uno capaz de, disponiendo de los conocimientos de programación adecuados (Fortran, C, etc.), abordar el diseño de programas o códigos de cálculo en computador para resolver los cálculos a los que las complicadas cuestiones a las que hay normalmente que hacer frente llevan, y que tomarían un tiempo desorbitado e incluso inalcanzable de ser realizadas manualmente. Todas las cuestiones de cálculo con computador quedan relegadas a las posibles ampliaciones que los estudiantes interesados puedan hacer en el futuro.

3. REQUISITOS PREVIOS RECOMENDABLES

Los prerrequisitos para cursar esta asignatura son los de haber cursado las asignaturas de Matemáticas previas existentes en los estudios de Grado, así como las de Termodinámica Clásica y de Química Física. En particular puede resultar muy provechoso haber cursado la Asignatura de Métodos de Cálculo en Química Teórica, también parte de estos estudios de Postgrado.

4. RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Los objetivos generales son los de conocer y saber aplicar determinadas herramientas básicas que son de uso común en el estudio teórico/computacional de sistemas macroscópicos (materia condensada) tanto a un nivel elemental como de investigación.

5. CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

1. Colectivos y funciones de partición.
2. Equilibrio y funciones de distribución clásicas.
3. Aplicación al estudio de gases, líquidos y sólidos (clásicos).
4. El método de simulación Monte Carlo.
5. Herramientas matemáticas.



6. Formulación clásica de la Termodinámica de no equilibrio

7. El modelo de Termodinámica Extendida.

8. Mecánica de medios continuos.

6.EQUIPO DOCENTE

- [MANUEL CRIADO SANCHO](#)
- [LUIS MARIANO SESE SANCHEZ](#)

7.METODOLOGÍA

Al tratarse de una materia eminentemente conceptual el aprendizaje estará fundamentalmente basado en:

-Actividades prácticas de tipo ensayo sobre los contenidos de la asignatura.

-Comentario de artículos de investigación (opcional).

-En casos especiales, y una vez acreditada una suficiencia en los en las actividades previas, el estudiante que posea conocimientos de programación de computadores y acceso a razonables medios de cálculo (PC con compilador para cálculo numérico), también podría desarrollar aplicaciones de simulación con computador para resolver problemas numéricos relacionados con la disciplina.

Tiempo de estudio de cada capítulo = 18 horas

Total tiempo de estudio de 7 capítulo = 126 horas

Tiempo empleado en cada trabajo = 11 horas

Total tiempo empleado en 2 trabajos = 22 horas

Tiempo empleado en el examen = 2 horas

Tiempo total = 150 horas

8.BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13): 9788436225778

Título: TERMODINÁMICA QUÍMICA MOLECULAR (1ª)

Autor/es: Sesé Sánchez, Luis M. ; Criado Sancho, Manuel ;

Editorial: UNED

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico



ISBN(13): 9788436258738
Título: HERRAMIENTAS Y MODELOS DE LA TERMODINÁMICA DE SISTEMAS CONTINUOS
Autor/es: Manuel Criado-Sancho ;
Editorial: UNED

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

ISBN(13): 9788478290680
Título: TERMODINÁMICA QUÍMICA Y DE LOS PROCESOS IRREVERSIBLES (2ª)
Autor/es: Casas Vázquez, José ; Criado Sancho, Manuel ;
Editorial: PEARSON

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

9. BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

LIBRO ACTUALMENTE NO PUBLICADO
ISBN(13):
Título: EXTENDED IRREVERSIBLE THERMODYNAMICS (3a, 2001)
Autor/es: D. Jou, J. Casas-Vázquez Y G. Lebon, ;
Editorial: Springer

Comentarios y anexos:

Como textos de ampliación para la Termodinámica Estadística se recomiendan:

R. Balescu, Equilibrium and nonequilibrium statistical mechanics, John Wiley & Sons, Nueva York, 1975

D. A. McQuarrie, Statistical Mechanics, Harper & Row, Nueva York, 1976

10. RECURSOS DE APOYO AL ESTUDIO

A través de la plataforma virtual Alf se suministrará todo el material didáctico elaborado específicamente para el máster: documentación teórica y práctica, lecturas, artículos, enlaces a páginas Web.

La plataforma de e-learning Alf proporcionará el adecuado interfaz de interacción entre el alumno y sus profesores. Alf es una plataforma de e-learning y colaboración que permite impartir y recibir formación, gestionar y compartir documentos, y crear y participar en comunidades temáticas.

Se ofrecerán las herramientas necesarias para que, tanto el equipo docente como el alumnado, encuentren la manera de



compaginar tanto el trabajo individual como el aprendizaje cooperativo.

11.TUTORIZACIÓN Y SEGUIMIENTO

En esta asignatura no se contempla la realización de Pruebas de Evaluación a Distancia convencionales. En su lugar a lo largo del curso el equipo docente propondrá al estudiante la realización (en su domicilio) de dos trabajos obligatorios, uno de Mecánica Estadística del Equilibrio y otro correspondiente al No Equilibrio. Dependiendo del nivel que posea el estudiante (a determinar previamente con los profesores del Equipo Docente) éste podrá optar entre las siguientes alternativas para cada parte:

A)Ejercicio de ensayo sobre los contenidos y métodos mostrados en la asignatura. La extensión inicial del material escrito (mecanografiado) que se presente como ejercicio no deberá ser inferior a veinte páginas ni superior a treinta.

B)Comentario de artículos de investigación o de métodos de trabajo científico avanzados.

C)Realización de cálculos a nivel intermedio, siendo entonces necesario disponer por parte del estudiante de facilidades de cálculo con computador y conocimientos de algún lenguaje de programación (Fortran, Basic, C, Pascal, etc.). Los cálculos tendrán que ver con algún problema extraído de la disciplina y la presentación de este tipo de trabajo deberá incluir una discusión completa tanto del problema estudiado como de los resultados obtenidos.

Estos trabajos estarán sujetos a un proceso de revisión (evaluación) continua. Una vez concluidos deben remitirse para su revisión al equipo docente/tutor (dependiendo de las circunstancias), que lo devolverá al estudiante, para que en su caso, efectúe las correcciones pertinentes. El proceso continuará hasta que se garantice una comprensión mínima de la materia. Estos trabajos obligatorios formarán parte de la calificación final en un porcentaje que se especifica en Evaluación.

De carácter obligatorio será también la realización de un Examen que medirá la comprensión global de la materia. Puede ser necesaria la utilización de una calculadora de escritorio. El porcentaje con el que este Examen contribuirá a la calificación final se especifica también en el apartado de Evaluación.

La tutorización de los alumnos se llevará a cabo a través de la plataforma de e-learning Alf o por cualquier otro medio de contacto (e-mail, teléfono, etc.).

12.EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES

La evaluación (continua) de los dos trabajos obligatorios propuestos contribuirá a la calificación final en un $30\%+30\%=60\%$, siendo ambos trabajos una medida de las competencias genéricas (capacidad de buscar, acceder y manejar información, resolver nuevos problemas, y ser autónomo) adquiridas por el estudiante durante el curso. El Examen contribuirá a la calificación final con el 40% restante, midiendo así los conocimientos y habilidades específicas de una forma global. Se exigirá un mínimo de un 30% satisfecho en la contribución "trabajos" y un 20% satisfecho en el Examen, para conseguir una evaluación positiva global en la asignatura. Se entiende además que si alguno de los dos trabajos no se realiza o es calificado como nulo, no se podrá obtener una evaluación positiva global para la asignatura.

13.COLABORADORES DOCENTES

Véase equipo docente.

