



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE FÍSICA "LUIS RIVERA TERRAZAS"

PLAN DE ESTUDIOS:

DOCTORADO EN CIENCIAS
(En la especialidad de Ciencia de Materiales)

PNPC-000094

2012

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

Vicerrectoría de Investigación y Estudios de Posgrado

Dirección General de Estudios de Posgrado

Nombre del Posgrado: **DOCTORADO EN CIENCIAS (EN LA ESPECIALIDAD DE CIENCIA DE MATERIALES)**

Unidad Académica:	Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas"
Programa de Posgrado:	Doctorado en Ciencias (en la especialidad de Ciencia de Materiales)
Título que se otorga:	Doctorado en Ciencias (en la especialidad de Ciencia de Materiales)
Niveles contemplados en el mapa curricular: básico, formativo y optativas, por semestres	
Créditos mínimos y máximos para la obtención del grado:	60--72
Número de semanas por semestre	20 semanas

Código	Opción A (con exámenes generales aprobados)					Opción B (con exámenes generales aprobados en la 1ra. Oportunidad)					Opción C (con exámenes generales aprobados en la 2da. Oportunidad)				
	Asignaturas	HT	HP	TC	Requisitos	Asignaturas	HT	HP	TC	Requisitos	Asignaturas	HT	HP	TC	Requisitos
1º Semestre															
	<ul style="list-style-type: none"> Optativa Inicio de tesis doctoral 	6		12		<ul style="list-style-type: none"> Seminario de preparación de exámenes generales Presentación de examen general (1ra. Oportunidad) 	6		12		<ul style="list-style-type: none"> Seminario de preparación de exámenes generales Presentación de examen general (1ra. Oportunidad) 	6		12	
2º Semestre															
	<ul style="list-style-type: none"> Optativa - Tesis doctoral - Presentación de Examen Preliminar 	6		12		<ul style="list-style-type: none"> Optativa Inicio de tesis doctoral 	6		12		<ul style="list-style-type: none"> Optativa Presentación de examen general (2da. Oportunidad) 	6		12	
3º Semestre															

	• Optativa Tesis doctoral	6		12		• Optativa - Tesis doctoral - Presentación de Examen Preliminar	6		12		• Optativa Inicio de tesis doctoral	6		12	
4º Semestre															
	• Seminario de Tesis I Tesis doctoral	6		12		• Optativa -Tesis doctoral	6		12		• Optativa -Tesis doctoral -Presentación de Examen Preliminar	6		12	
5º Semestre															
	• Seminario de Tesis II Tesis doctoral	6		12		• Seminario de Tesis I Tesis doctoral	6		12		• Seminario de Tesis I -Tesis doctoral	6		12	
6º Semestre															
	Tesis Doctoral					• Seminario de Tesis II Tesis doctoral	6		12		• Seminario de Tesis II -Tesis doctoral	6		12	
7º Semestre															
	Tesis doctoral					Tesis doctoral					Tesis doctoral				
8º Semestre															
	• Tesis doctoral • Presentación de examen de grado.					Tesis doctoral Presentación de examen de grado					Tesis doctoral Presentación de examen de grado				
	Total de créditos	30		60			36		72			42		72	

HT: Horas teoría

HP: Horas práctica

TC: Total de créditos

Cursos Optativos: El mapa curricular será estructurado por el Comité Académico y el asesor de cada estudiante. El número de materias optativas que se cursarán serán las que se juzguen convenientes para la formación integral del mismo. En el diseño del programa de las materias optativas, el estudiante cursará un mínimo de tres materias. En este programa el seminario de preparación de exámenes generales será una materia obligatoria según sea el caso. Adicionalmente se cursará el seminario de tesis I y Seminario de tesis II como materias obligatorias en el Doctorado.

MATERIAS OPTATIVAS*

Las materias optativas son comunes a la Maestría y al Doctorado (los estudiantes de Doctorado sólo cursan materias optativas).

DOCTORADO

Análisis de Superficies
Cerámicas
Cristales Fotónicos.
Difracción de rayos X
Espectroscopía óptica de Sólidos
Estado Sólido Avanzado.
Estructura Electrónica de Sólidos.
Físico–Química de Superficies.
Interacción Radiación–Materia
Materiales Amorfos
Materiales Heterogéneos
Metalurgia
Modelado Computacional de Materiales
Nanoestructuras
Óptica Moderna
Polímeros
Propiedades Elásticas de Materiales
Propiedades Eléctricas de Materiales.
Propiedades ópticas de Materiales
Propiedades Ópticas de Superficies e interfaces.
Química Cuántica Computacional.
Química Cuántica de Sólidos
Semiconductores
Sistemas Mesoscópicos
Superconductores
Superficies e Interfaces de Materiales
Teoría de Líquidos.
Termodinámica de Procesos Irreversibles
Termodinámica Estadística de Materiales

* El Comité Académico determinará el programa de materias optativas de cada estudiante.

ANÁLISIS DE SUPERFICIES

OBJETIVO

Dar una base profunda al estudiante de los conceptos teóricos y de las técnicas experimentales que le permitan entender rigurosamente los fenómenos que ocurren en las superficies de los materiales.

CONTENIDO

- Introducción: ¿Qué es la superficie?. Técnicas de vacío y ultra alto vacío. Adsorción de superficie. Técnicas de análisis de superficies (limitaciones y ventajas).
- Cristalografía Superficial y Difracción: Difracción de electrones y red recíproca. Dominios, escalones y defectos. Difracción de electrones de baja energía (LEED): generalidades y métodos de transformada de Fourier. Elementos básicos de teorías de dispersión múltiple y aplicaciones. Efectos térmicos. Difracción de electrones reflejados de alta energía (RHEED): métodos de Rayos-X para determinación de la estructura superficial y aplicaciones.
- Espectroscopías Electrónicas: Espectroscopía de fotoelectrones producidos con rayos-X (XPS): Introducción, fuentes de fotones. XPS de niveles de los electrones en la coraza atómica. Radiación sincrotrónica. Efectos estructurales en XPS. Espectroscopía de electrones Auger (AES): Procesos básicos. Forma de línea y variación energética. Análisis de composición superficial. Efectos estructurales.
- Microscopías de Tunelamiento: Microscopía de barrido por tunelamiento. Microscopía de fuerza atómica.
- Estudio de Superficies Mediante Procesos Ópticos: Espectroscopía de átomos adsorbidos y moléculas: Dispersión Raman. Espectroscopía de Infrarrojo: absorbencia, reflectancia, ATR. Fotoluminiscencia.

BIBLIOGRAFÍA

1. D.P. Woodruff, T. A. Delchar, Modern Techniques of Surface Science, 2nd edition (Cambridge University Press, 1994).
2. R.V. Stuart, Vacuum Technology, Thin Films and Sputtering (an Introduction) (Academic Press, 1982).
3. A. Zangwill, Physics at Surfaces (Cambridge University Press, 1988).
4. H. Ibach, ed., Electron Spectroscopy for Surface Analysis (Topics in Current Physics) (Springer-Verlag, 1977).
5. F.R. Aussenegg, A. Leitner and M. E. Lippitsch, eds., Surface Studies with Lasers (Chemical Physics 33) (Springer-Verlag, 1983).

CERÁMICAS

OBJETIVO

Profundizar los conocimientos sobre los procesos de preparación y control de las propiedades de los materiales cerámicos.

TEMARIO

I) Química de Precursores Cerámicos

- ✓ ALCÓXIDOS METÁLICOS.
- ✓ Sol–Gel.

II) Microestructura de las Cerámicas

- ✓ Diagramas de Fases Cerámicas.
- ✓ Reacciones entre Sólidos.
- ✓ Crecimiento de Grano, Sinterización.
- ✓ Microestructura.

III) Propiedades de las cerámicas

- ✓ Térmicas.
- ✓ Ópticas.
- ✓ Deformación Plástica.
- ✓ Elasticidad.
- ✓ Tensiones Térmicas y de Composición.
- ✓ Conductividad Eléctrica.
- ✓ Propiedades Dieléctricas.
- ✓ Propiedades Magnéticas.

BIBLIOGRAFÍA

1. W. D. Kingery, H. K. Bowen, D.R. Uhlmann, Introduction to Ceramics, 2nd edition (John Wiley & Sons, 1976).
2. D.R. UHLMANN, D.R. ULRICH, ULTRASTRUCTURE PROCESSING OF ADVANCED MATERIALS (JOHN WILEY & SONS, 1992).

CRISTALES FOTÓNICOS

OBJETIVO

Aprender los conceptos y herramientas necesarias para el análisis de prototipos de cristales fotónicos, obteniendo así un panorama de los problemas actuales en el área.

CONTENIDO

- Introducción: Cristales fotónicos.
- Electromagnetismo en medios dieléctricos: Ecuaciones de Maxwell; Electromagnetismo como un problema de eigenvalores; propiedades de escalado de las ecuaciones de Maxwell; comparación de electrodinámica y mecánica cuántica.
- Simetría y electromagnetismo del estado sólido: Uso de simetrías para la clasificación de los medios electromagnéticos; simetría traslacional (continua y discreta); estructura de bandas fotónicas; simetría rotacional y zonas irreducibles; separación de modos; invariancia bajo inversión temporal.
- Sistemas unidimensionales: Origen de los gaps fotónicos; modos evanescentes.
- Modos localizados en defectos: Estados de superficie.
- Sistemas bidimensionales: Estados de Bloch bidimensionales; tipos de redes; gaps completos; propagación fuera del plano de la periodicidad; localización de luz por defectos, estados de superficie.
- Sistemas tridimensionales: Cristales con gaps fotónicos completos; localización en defectos puntuales y lineales; localización en superficies.

BIBLIOGRAFÍA

1. J. D. Joannopoulos, R. D. Meade & J. N. Winn, Photonic Crystals: Molding the Flow of Light (Princeton University Press, 1995).
2. N. W. Ashcroft & N. D. Mermin, Solid State Physics (Saunders College, Philadelphia, 1976).
3. J. D. Jackson, Classical Electrodynamics (John Wiley & Sons, New York, 1962).

DIFRACCIÓN DE RAYOS X

OBJETIVO

Profundizar los conocimientos sobre el fenómeno de difracción, en particular la relacionada con radiación de alta energía con el fin de determinar la estructura cristalina de diversos materiales.

TEMARIO

I) NATURALEZA DE LOS RAYOS X.

- ✓ Fuentes.
- ✓ Espectros continuos y característicos.
- ✓ Absorción.
- ✓ Difusión Compton.

II) DIFUSIÓN COHERENTE Y DIFRACCIÓN.

- ✓ Difusión coherente por un átomo con varios electrones.
- ✓ Difusión coherente de un objeto con un arreglo desordenado de átomos.
- ✓ Difracción.
- ✓ Ecuación de Bragg y construcción de Ewald.
- ✓ Factor de estructura.
- ✓ Difusión anómala.

III) DENSIDAD ELECTRÓNICA.

- ✓ Aplicación de la serie de Fourier.
- ✓ Función de Patterson.

IV) MÉTODOS EXPERIMENTALES.

- ✓ MÉTODOS CON POLVOS.
- ✓ Métodos con Monocristales.

V) PAQUETES COMPUTACIONALES.

BIBLIOGRAFÍA

1. D.B. Cullity, Elements of X-ray diffraction (Addison-Wesley, 1978).
2. B.K. Vainshtein, Modern Crystallography I (Springer-Verlag, 1981).

ESPECTROSCOPIA ÓPTICA DE SÓLIDOS

OBJETIVO

Estudiar los principios teóricos y técnicas experimentales para medir las propiedades ópticas de materiales sólidos.

CONTENIDO

- Radiación electromagnética y fuentes de luz: Teoría de Maxwell de las ondas electromagnéticas; radiación por cargas aceleradas; transformada de Fourier y tratamiento de la radiación no-monocromática; radiación de cuerpo negro y lámparas de descarga eléctrica en gases; líneas espectrales; fuentes de luz laser; coherencia y correlación de luz.
- Instrumentación para el análisis espectral y la detección de la luz: Filtros ópticos; polarizadores y placas de fase; fibras y tubos ópticos; monocromadores de prisma y de rejilla; interferómetro de Fabry-Perot.
- La función dieléctrica de los sólidos: Constantes ópticas; relaciones de dispersión de Kramers-Kronig; contribuciones físicas a la función dieléctrica; la función dieléctrica para osciladores armónicos y para portadores libres; intensidad del oscilador y la regla de la suma; determinación experimental de la función dieléctrica.
- Espectroscopía en el visible y en el infrarrojo cercano: Descripción mecánico-cuántica de la absorción óptica; transiciones permitidas directas al borde de la banda de absorción; transiciones prohibidas y transiciones asistidas por fonón; absorción por excitones extendidos y localizados; absorción por defectos; luminiscencia por semiconductores y por defectos puntuales en aisladores.
- Espectroscopía por esparcimiento de la luz: Técnicas experimentales; espectroscopía por esparcimiento Raman y por esparcimiento de Brillouin.
- Espectroscopía Infrarroja: Fuentes de radiación; componentes ópticas y detectores; espectroscopía de Fourier; absorción para transiciones electrónicas y vibrónicas; absorción y reflexión de luz infrarroja en cristales; reflexión total atenuada; aplicaciones en Física de semiconductores; propiedades de los metales en el infrarrojo.

BIBLIOGRAFÍA

1. H. Kuzmany, Solid State Spectroscopy: An Introduction (Springer, 1998).
2. A. A. Kaplyanskii & R. M. McFarlane, Spectroscopy of Solids Containing Rare Earth Ions (Elsevier, 1987).
3. M. Cardona ed., Light Scattering in Solids I, 2nd edition (Springer, 1983).
4. W. M. Yen & P. M. Selzer, Light Spectroscopy of Solids (Springer-Verlag, 1986).

ESTADO SÓLIDO AVANZADO

OBJETIVO

Dar al estudiante una base profunda de los conceptos teóricos que le permitan entender rigurosamente algunos fenómenos observados en los sólidos.

CONTENIDO

- Dinámica de la red cristalina: Aproximación adiabática; constantes de fuerza interatómica y sus propiedades; ecuación de movimiento y solución; transformación a coordenadas normales; espectro de frecuencias y propiedades termodinámicas; cristales iónicos; constantes elásticas, piezoeléctricas y dieléctricas.
- Cálculo de bandas electrónicas: Teorema de Bloch; teoría de perturbación $k \cdot p$; funciones de Wannier; simetrías cristalinas; grupos de simetría y representaciones; energía contra vector de onda en la zona reducida; método de amarre fuerte (principios fundamentales, método de Slater y Koster); método de pseudopotenciales.
- Magnetismo en sólidos: Diamagnetismo y Paramagnetismo, ley de Curie; Estructura magnética, intercambio; modelo de Hubbard; efecto Kondo; orden magnético; ferromagnetismo, magnones; antiferromagnetismo; teoría del campo medio.
- Superconductividad. Propiedades fundamentales; tipos de superconductores; teoría BCS; teoría de Ginzburg-Landau; efecto Josephson.

BIBLIOGRAFÍA

1. A. Maradudin, Elements of the Theory of Lattice Dynamics in Dynamical Properties of Solids, (edited by G. K. Horton & A. A. Maradudin, Vol. 1, North Holland, Amsterdam, 1974).
2. Kittel, Quantum Theory of Solids (John Wiley and Sons, New York, 1987).
3. Allen Nussbaum, Crystal Symmetry, Group Theory and Band Structure Calculations (in Solid State Physics, edited by F. Seitz & D. Turnbull, Vol. 18, Academic Press, San Diego, 1996).
4. W. Harrison, Pseudopotentials in the Theory of Metals (Benjamin, Reading, Mass. 1966).
5. N. W. Ashcroft & D. Mermin, Solid State Physics (Saunders College Publishing, 1976).
6. M. Tinkham, Group Theory and Quantum Mechanics (McGraw-Hill, New York, 1964).
7. T. P. Sheahen, Introduction to High Temperature Superconductivity (Plenum, New York, 1994).

ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE SÓLIDOS

OBJETIVO

Aprender los conceptos necesarios para el estudio y análisis de la estructura electrónica de sólidos.

CONTENIDO

- Modelo del electrón libre.
- Simetría y teoría de grupos. Grupos, subgrupos, conjugados y clases; transformación de funciones y de operadores; representaciones (reducción, similitud y caracteres); representaciones irreducibles; grupos espaciales.
- Red recíproca y series de Fourier.
- Funciones de Bloch y zonas de Brillouin. Grupo de traslaciones; vectores equivalentes y zona de Brillouin; base para la representación (funciones de Bloch); bandas.
- Zonas de Brillouin y bandas de energía. Propiedades de las zonas de Brillouin; bandas de energía: llenado de bandas, conductores, semiconductores y aislantes; superficies de Fermi, huecos, semiconductores y semimetales; masa efectiva.
- Métodos de cálculo de estructura de bandas. Método de Pseudopotencial (factores de forma, métodos empíricos y autoconsistentes); método de la masa efectiva o k.p. (masa efectiva, bandas de valencia en semiconductores tipo zincblenda y diamante); método Tight-Binding o LCAO (orbitales atómicos y parámetros de traslape, elementos del grupo IV, semiconductores II-VI y III-V).

BIBLIOGRAFÍA

1. M. L. Cohen & J. R. Chelikowsky , Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors (Springer-Verlag, 1989).
2. Simon L. Altman, Band Theory of Solids, an Introduction from the Point of View of Symmetry (Claredon Press, 1991).
3. Peter Y. Yu & Manuel Cardona, Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties (Springer-Verlag, 1999).

FÍSICO–QUÍMICA DE SUPERFICIES

OBJETIVO

Aprender los fundamentos para la descripción de las interacciones que sufren las superficies con los sustratos y el medio ambiente, después de su crecimiento, así como también los mecanismos de crecimiento de superficies y análisis de superficies in–situ y ex–situ con algunas técnicas convencionales.

CONTENIDO

- Introducción.
- Formación de superficies por diferentes técnicas.
- Mecanismos de formación de películas en diferentes superficies (teorías de Nucleación, crecimiento y coalescencia).
- Adhesión, coeficiente de pegado, observaciones de nucleación, centros de nucleaciones, temperatura de condensación.
- Teoría de quimisorción, interacciones Adsorbato–Adsorbato, comparación entre sustratos fcc y bcc.
- Caracterización de superficies in–situ por diferentes técnicas.
- Caracterización de superficies ex–situ por diferentes técnicas.

BIBLIOGRAFÍA

1. K.L. Chopra, Thin Film Phenomena (Robert E. Krieger Publishing Co., New York, 1979).
2. Ludmila Ecketova, Physics of Thin Films (Plenum Press).
3. R. Gomer ed., Interactions on Metal Surfaces (Springer–Verlag, N.Y. 1975).
4. Grahm C. Smith, ed. P.J. Dobson, Surface Analysis by Electron Spectroscopy (Plenum Press, N.Y.)

INTERACCIÓN RADIACIÓN–MATERIA

OBJETIVO

Dar una base formal al estudiante de los conceptos físicos y de la herramienta matemática que le permitan entender rigurosamente los fenómenos de la interacción de la radiación con la materia.

CONTENIDO

- Ley de la Radiación de Planck y los Coeficientes de Einstein: Cuantización de la energía del campo, ley de Planck, fluctuaciones en el número de fotones, coeficientes de Einstein, Teoría de procesos ópticos simples, teoría macroscópica y microscópica de la absorción, inversión de población.
- Mecánica Cuántica de la Interacción radiación–átomo: Hamiltoniano de interacción, razón de transición, las ecuaciones ópticas de Bloch y ecuaciones de razón, oscilaciones de Rabi, ensanchamientos: radiativos, de potencia, de colisión y Doppler.
- Campo de Radiación Cuantizado: Teoría del potencial para el campo electromagnético clásico, oscilador armónico cuántico, cuantización del campo, estados fotónicos coherentes, operador de densidad radiativa.
- Interacción del átomo con un campo cuantizado: Segunda cuantización del hamiltoniano atómico, razón de absorción y emisión fotónica, operador de intensidad fotónica, razón general para transiciones radiativas, sistema radiación–átomo dependiente del tiempo, representaciones de transformación Heisenberg y de interacción.
- Generación y Amplificación de la Luz: Ecuaciones de razón de un modo fotónico simple, soluciones del estado estacionario, estadísticas fotónicas de luz atenuada y aplicada, condición de láser, fluctuaciones en la luz láser.
- Fluorescencia Resonante y Dispersión de luz: sección transversal de dispersión, fluorescencia resonante de un átomo simple y de muchos átomos, dispersión Raman y Reyleigh.

BIBLIOGRAFÍA

1. R. Loudon, The quantum theory of light, 2nd edition (Oxford University Press, 2000).
2. J.D. Jackson, Classical Electrodynamics 3rd edition (J. Wiley and Sons, 1998).
3. K. Huang, Statistical Mechanics, 2nd edition (J. Wiley and Sons, 1987).
4. E. MERZBACHER, QUANTUM MECHANICS, 2ND EDITION (WILEY INTERNATIONAL EDITION, 1998).

MATERIALES AMORFOS

OBJETIVO

Dar al estudiante los elementos teóricos fundamentales para el estudio de las propiedades físicas de los materiales amorfos, su caracterización y aplicaciones.

CONTENIDO

- **Orden y desorden**
 - ✓ Orden estructural: cristalino, no-cristalino
 - ✓ Tipos de desorden: cuasicristales, el estado amorfo
 - ✓ Modelos estructurales

- **Propiedades estructurales**
 - ✓ Factor de estructura y su transformada
 - ✓ Funciones de distribución
 - ✓ Caracterización por Difracción de Rayos X

- **Propiedades termodinámicas y fabricación**
 - ✓ Transición orden-desorden
 - ✓ Formación de vidrios y la transición vítrea

- **Propiedades electrónicas y de transporte de materiales desordenados**
 - ✓ Más allá de la Teoría de Bandas
 - ✓ Localización de Anderson, Transición de Mott
 - ✓ Conductividad eléctrica, conductividad por saltos, conductividad térmica

- **Aplicaciones**
 - ✓ Semiconductores altamente impurificados y amorfos
 - ✓ Celdas Solares
 - ✓ Electrofotografía, memorias ópticas
 - ✓ Materiales magnéticos desordenados

BIBLIOGRAFÍA

1. J.M.Ziman, Models of Disorder (Cambridge University Press, 1979).
2. N.F. Mott and E.A. Davis, Electron Processes in Non-Crystalline Materials (Clarendon Press, Oxford, 1979).
3. N.F. Cusack, The Physics of Structurally Disordered Matter (Institute of Physics, Great Britain, 1987).
4. A.P. Sutton, Electronic Structure of Materials (Clarendon Press, Oxford, 1993).
5. J. Tauc Franc, Amorphous and Liquid Semiconductors (Plenum Press, London and New York, 1993).
6. A. Madan and M.P. Shaw, The Physics and Applications of Amorphous Semiconductors (Academic Press Inc., San Diego, 1988).
7. P.C. Taylor and S.G. Bishop, Optical Effects in Amorphous Semiconductors (American Institute of Physics, New York, 1984).
8. L.L. Kazmerski, Polycrystalline and Amorphous Thin Films and Devices (Academic Press Inc., New York, 1980).

MATERIALES HETEROGÉNEOS

OBJETIVO

Proporcionar al estudiante un panorama actualizado de las tendencias de la investigación en el campo de los materiales compuestos, así como una introducción general a los conceptos, teorías, modelos físicos, técnicas matemáticas y aproximaciones necesarias para su estudio.

CONTENIDO

- Clasificación General de materiales compuestos: Compósitos granulares, aglomerados, laminados, etc.
- Propiedades mecánicas y estructura microscópica: Elementos de teoría de respuesta lineal. Microestructura y tensión, deformación, rigidez, dureza, relaciones de simetría de propiedades mecánicas.
- Propiedades físicas de materiales laminados: Aproximaciones locales y de campo promedio, aproximaciones no locales.
- Mesoestructura y propiedades mecánicas de materiales compuestos granulares.
- Propiedades térmicas de compósitos.
- Propiedades dieléctricas de compósitos granulares.
- Compósitos no sólidos: Micelas, espumas, aerosoles, geles, fluidos granulares.

BIBLIOGRAFÍA

1. S.W. Tsai and H.T. Hahn, Introduction to composite materials (Technomic, 1980).
2. Yu. I. Dimitrienko, Thermomechanics of composites under high temperatures (Kluwer Academic Press, 1999).
3. C.A. English, J.R. Matthews, H. Rauh, A.M. Stoneham and R. Thetford eds. Materials Modeling: From theory to technology (Institute of Physics Publishing).
4. G. Grimvall, ed., Thermophysical properties of materials (North Holland, 1986).
5. R.M. Christensen, Mechanics of composite materials (Krieger Publishing Company, 1990).
6. D.A. McQuarrie, Statistical Mechanics (Harper Coillins, 1976).
7. S.K. Ma, Modern Theory of Critical Phenomena, Frontiers in Physics Series (The Benjamin/Cummings Publishing Company, Advanced Book Program, 1976).

METALURGIA

OBJETIVO

Introducir a los estudiantes en los conocimientos básicos, tanto teóricos como experimentales de los procesos que estudia la Metalurgia.

CONTENIDO

- I) Diagramas de fase.
 - ✓ Soluciones sólidas.
 - ✓ Sistemas eutécticos.
 - ✓ Sistemas peritéticos.
 - ✓ Solidificación fuera de equilibrio.

- II) Aplicaciones de los diagramas de fase.
 - ✓ Sistema Hierro—Carbono.
 - ✓ Aleaciones de Cobre.
 - ✓ Aleaciones de Mg.

- III) Deformaciones elásticas y plásticas.
 - ✓ Deformación plástica.
 - ✓ Relación tensión—deformación.
 - ✓ Fractura.
 - ✓ Ensayos de las prop. plásticas.
 - ✓ Resistencia al desgaste.

- IV) Procesos de recocido.
 - ✓ Difusión.
 - ✓ Recocido.
 - ✓ Recristalización.

- V) Endurecimiento por envejecimiento.
 - ✓ Endurecimiento por precipitación.
 - ✓ Endurecimiento por ordenamiento.
 - ✓ Endurecimiento por reacciones de difusión.

- VI) Tratamiento térmico del acero.
 - ✓ Estructuras de equilibrio.
 - ✓ Estructuras martensíticas.
 - ✓ Templado.

- VII) Corrosión y oxidación.
- ✓ Corrosión electroquímica.
 - ✓ Oxidación.
 - ✓ Control de la corrosión y de la oxidación.

BIBLIOGRAFÍA

1. P. Hansen, ed., Physical Metallurgy, 3a. edition (Cambridge University Press, 1996).
2. H. Chandler, Metallurgy for the Non-Metallurgist (The Materials Information Society, 1998).

MODELADO COMPUTACIONAL DE MATERIALES

OBJETIVO

Aprender los fundamentos del modelado computacional de materiales, para la solución de problemas de estructura estática, dinámica y energética de ese tipo de sistemas. Introducir al estudiante en el manejo de software moderno especializado para esos fines.

CONTENIDO

- Introducción. Necesidad y alcance de la metodología.
- Métodos basados en la valencia de enlace.
- Optimización de la geometría vía minimización de la energía.
- Métodos de Dinámica Molecular.
 - ✓ Programa GULP. Programa CERIUS.
- Métodos de Montecarlo
 - ✓ Método de Metrópolis aplicado a la determinación de estructuras.
- Métodos de cálculo de estructura electrónica. Programas SIESTA, CRYSTAL.
- Casos de estudio.
 - ✓ Silicatos y materiales porosos.
 - ✓ Superconductores de alta Tc.
 - ✓ Irradiación de materiales. Programa MCNP.
 - ✓ Defectos puntuales en cristales.

BIBLIOGRAFÍA

1. De. C.R.A. Catlow, Computer Modelling in Inorganic Crystallography (Academic Press, 1996).
2. D. Frenkel, B. Smit, Understanding Molecular Simulation (Academic Press, 1996).
3. Manuales de los programas Gulp, Crystal, Cerius, MCNP.

NANOESTRUCTURAS

OBJETIVO

Conocer las principales características de materiales cuyas propiedades están determinadas por sus dimensiones nanométricas.

CONTENIDO

- Efectos de confinamiento. Generalidades.
 - ✓ Estados electrónicos .
 - ✓ Fonones.
 - ✓ Efectos de campo magnético y temperatura.
- Heteroestructuras.
- Superredes.
- Compuestos basados en Carbono. Fullerenos y nanotubos.
- Alambres y puntos cuánticos.
- Nanopartículas.

En cada tema –si es el caso-- se hablará de: Métodos de obtención, propiedades ópticas y magnéticas, etc., bajo distintas condiciones (temperatura, presión) así como fenómenos relevantes observados (bloqueo de Coulomb, etc.)

BIBLIOGRAFÍA

1. B.K. Ridley, *Electrons and Phonons in Semiconductor Multilayers* (Cambridge University Press, USA, 1997).
2. M.S. Dresselhaus, *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes* (Academic Press, San Diego, 1995).
3. M.A. Duncan, *Advances in Metal and Semiconductor Clusters* (Jai Press, 1996).
4. S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, UK, 1995).
5. L.L. Sohn, L.P. Kouwenhoven, G. Schön, eds., *Mesoscopic Electron Transport*, (Kluwer Pub., Netherlands, 1997).
6. Artículos de investigación.

ÓPTICA MODERNA

OBJETIVO

Estudiar las propiedades físicas de la luz, especialmente aquella producida por láseres, así como su propagación, interacción con elementos ópticos y su detección.

CONTENIDO

- Óptica Geométrica y Física.
- Óptica de haces Gaussianos producidos por láseres.
- Óptica de Fourier.
- Óptica electromagnética.
- Polarización de la luz y óptica de cristales.
- Óptica de ondas guiadas.
- Óptica estadística.
- Detección óptica.

BIBLIOGRAFÍA

1. B. R. Saleh & M. C. Teich, Fundamentals of Photonics (John Wiley & Sons, 1991).
2. M. Born & E. Wolf, Principles of Optics (Pergamon Press, 1980).
3. E. Hecht & A. Zajac, Optics (Addison Wesley, 1986).

POLÍMEROS

OBJETIVO

Familiarizar al estudiante con los principios fundamentales de la química y física de los materiales poliméricos. Al finalizar el programa el estudiante tendrá la herramienta esencial para entender la literatura, los procesos de fabricación y la síntesis de materiales poliméricos. Aprenderá también a relacionar la estructura del polímero con sus propiedades.

CONTENIDO

- **Introducción**
 - ✓ Conceptos básicos en macromoléculas. Polímeros Industriales y su nomenclatura.

- **Métodos de Síntesis de Macromoléculas**
 - ✓ Resumen de los métodos de síntesis de macromoléculas.
 - ✓ Cinética de Polimerización por radicales libres.
 - ✓ Cinética de Policondensación.
 - ✓ Técnicas experimentales de polimerización.
 - ✓ Ejercicios.

- **Físicoquímica de Macromoléculas**
 - ✓ Pesos moleculares y polidispersidad de las macromoléculas.
 - ✓ Determinación de pesos moleculares.
 - ✓ Soluciones macromoleculares.
 - ✓ Temperatura de transición vitria.
 - ✓ Temperatura de Fusión.
 - ✓ Ejercicios.

- **Exposición de Seminario**

BIBLIOGRAFÍA

1. H. G. Elias, *Macromolecules* (Plenum press, New York, 1984).
2. H. G. Barth and J. W. Mays, eds. *Modern Methods of Polymer Characterization* (Wiley, New York, 1991).
3. D. G. Gray, B. R. Harkness, *Liquid Crystalline and Mesomorphic Polymers*. (Eds: V. P. Shibaev, L.Lam, Springer, New York 1994).
4. D. Acierno, W. brostow, A. A. Collier, *Liquid Crystals Polymers: from Structure to Applications* (Elsevier Applied Science, Londres, 1996).
5. Nicholas P. Cheremisinoff, *Handbook of Engineering Polymeric Materials* (Marcel Dekker, Inc., New York, 1997).
6. Franek, Z.J. Jedlinski, J. Majnusz. *Handbook of Polymer Synthesis, Part B* (Marcel Dekker, New York, 1992).

PROPIEDADES ELÁSTICAS DE MATERIALES

OBJETIVO

Estudiar las leyes físicas de la mecánica de los medios continuos, particularmente las bases de la mecánica y termodinámica de deformaciones elásticas. Los estudiantes deberán aprender a describir las deformaciones dinámicas y estáticas usando las características principales de los medios continuos: vector de desplazamiento, tensor de deformaciones y tensor de tensión. Este curso es la base para el estudio de la física de plasticidad y resistencia de materiales.

CONTENIDO

- Cinemática de medios continuos. Aproximaciones de Lagrange y Euler.
- Deformaciones elásticas y plásticas de sólidos.
- Vector de elongación y tensor de elongación.
- El tensor de tensiones. Ley de Hook. Diferentes tipos de deformaciones en medios continuos.
- Cuerpos isotrópicos. La ecuación de equilibrio.
- Deformaciones elásticas de varillas, esferas y cilindros huecos.
- Deformaciones de cuerpos elásticos en contacto.
- Ondas elásticas en un medio isotrópico. Ondas transversales y longitudinales.
- Reflexión de ondas elásticas por una superficie.
- Vibraciones elásticas de una esfera y una cavidad.
- Ondas elásticas en cristales.
- Ondas de Rayleigh.
- Vibraciones de varillas y placas.
- Defectos mecánicos en sólidos. Dislocaciones.
- El vector de Burger de una dislocación.
- Deformaciones elásticas cerca de dislocaciones.
- Ondas elásticas en medios periódicos.

BIBLIOGRAFÍA

1. L.D. Landau and I.M. Lifshitz, Theory of Elasticity (Pergamon Press).
2. J.W. S. Rayleigh, The Theory of Sound (Dover).

PROPIEDADES ELÉCTRICAS DE MATERIALES

OBJETIVO

Proporcionar al estudiante los fundamentos de la teoría cinética de transporte de carga en materiales conductores.

CONTENIDO

- Teoría electrónica de la conductividad. Ley de ohm.
- Tiempo de recorrido libre.
- Función de distribución electrónica.
 - ✓ Valores medios de cantidades físicas.
- Clasificación de materiales de acuerdo con su conductividad.
- Concentración de portadores en equilibrio térmico.
- Estadística de electrones y huecos en semiconductores.
- Fenómenos cinéticos en semiconductores.
 - ✓ Ecuaciones cinéticas de Boltzmann.
 - ✓ Tiempo de relajación.
 - ✓ Densidad de corriente eléctrica y densidad de flujo de energía.
 - ✓ Conductividad de semiconductores.
 - ✓ Efectos galvanomagnéticos.
 - ✓ Efecto de Hall en un material con diferentes tipos de portadores de carga.
 - ✓ Efectos termoeléctricos.
 - ✓ Análisis general de los fenómenos cinéticos.
- Teoría de dispersión de portadores de carga.
 - ✓ Sección transversal efectiva de dispersión.
 - ✓ Relación entre tiempo de relajación y sección transversal efectiva.
 - ✓ Dependencia de la movilidad de los portadores de carga en función de la temperatura.
- Ecuación de Continuidad.
- Mecanismos de recombinación.
- Recombinación y arrastre de los portadores de carga fuera de equilibrio.
- Recombinación superficial.
- Determinación experimental de la conductividad eléctrica de diferentes materiales.

BIBLIOGRAFÍA

1. P.S. Kireev, Semiconductor Physics (MIR Publication, Moscow, 1975).
2. K. Seeger, ed., Semiconductor Physics: an Introduction, 7th edition (Springer-Verlag, Berlin, 1999).
3. R.A. Smith, Semiconductors (Cambridge University Press, London, 1978).

PROPIEDADES OPTICAS DE MATERIALES

OBJETIVO

Dar al estudiante una base profunda de los conceptos teóricos y experimentales que le permitan entender rigurosamente las propiedades ópticas de materiales.

CONTENIDO

- ELECTRODINÁMICA MACROSCÓPICA
 - ✓ Determinación experimental de las constantes ópticas.
 - ✓ Relaciones de Kramers-Kronig.

- LA FUNCIÓN DIELECTRICA
 - ✓ Resultados experimentales.
 - ✓ Teoría microscópica de la función dieléctrica.
 - ✓ Singularidades de Van Hove.
 - ✓ Singularidades de Van Hove en ϵ_i .
 - ✓ Bordes de absorción directa e indirecta.

- EXCITONES
 - ✓ Efectos excitónicos en puntos críticos M_0 .
 - ✓ Espectro de absorción de excitones.
 - ✓ Efectos excitónicos de puntos críticos M_1 o excitones hiperbólicos.
 - ✓ Efectos excitones en puntos críticos M_3 .

- ABSORCIÓN DE RED Y FONÓN-POLARITÓN
 - ✓ Fonón-Polaritón.
 - ✓ Absorción de red y reflexión.
 - ✓ Absorción de red multifonónica.

- ESPECTROSCOPIAS DE MODULACIÓN
 - ✓ Reflectancia modulada y termorefectancia.
 - ✓ Piezorefectancia.
 - ✓ Electroreflectancia (efecto Franz-Keldysh).
 - ✓ Fotorefectancia.
 - ✓ Espectroscopía de reflectancia diferencial.

- ESPECTROSCOPIA INFRARROJA DE MATERIALES HETEROGÉNEOS (COMPÓSITOS)
 - ✓ Transmisión y reflexión.
 - ✓ Reflectancia total atenuada (ATR).
 - ✓ Espectroscopía de absorción reflexión.
 - ✓ Reflectancia difusa de infrarrojo por transformada de Fourier.

- ✓ Espectroscopía Fotoacústica.
- PROPIEDADES ÓPTICAS DE PELÍCULAS DELGADAS POLICRISTALINAS SEMICONDUCTORAS
 - ✓ Técnicas experimentales para determinar las constantes ópticas.
 - ✓ Transmisión y reflectancia a incidencia normal.
 - ✓ Elipsometría.
 - ✓ Los efectos de la rugosidad de la superficie e inhomogeneidades.
 - ✓ Modelos de las propiedades ópticas de los semiconductores policristalinos.
 - ✓ Coeficiente de absorción de semiconductores monocristalinos.
 - ✓ Semiconductores policristalinos como una mezcla de materiales amorfos y cristalinos.
 - ✓ El modelo de Dow-Redfield.
 - ✓ Aplicaciones del modelo de Dow-Redfield a semiconductores policristalinos.

BIBLIOGRAFÍA

1. P.Y. Yu and M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors, 2nd edition (Springer, Berlin, 1996).
2. H. Ishida, ed., Characterization of Composite Materials (Butterworth-Heinemann, Boston, 1994).
3. L.L. Kazmerski, ed., Polycrystalline and Amorphous Thin Films and Devices (Academic Press, 1980).
4. J.I. Pankove, Optical Processes in Semiconductors (Dover, 1971).
5. A.S. Davidov, Teoría de Sólidos (Ed. MIR, Moscú, 1981).
6. N.M. Ashcroft and D. Mermin, Solid State Physics (New York, 1976).

PROPIEDADES ÓPTICAS DE SUPERFICIES E INTERFACES

OBJETIVO

Introducir a los estudiantes en el estudio de las propiedades de superficies e interfaces de sistemas convencionales. El curso se enfoca a entender la física de las cuasipartículas llamadas plasmones, fonones y excitones, sin campo externo aplicado y tomando en cuenta los efectos de campos aplicados.

CONTENIDO

- Las ecuaciones de la electrodinámica clásica: Ecuaciones de Maxwell en el vacío; campos y fuentes; ecuaciones de Maxwell en medios materiales; condiciones de contorno.
- La función respuesta: Las relaciones de Kramers-Kronig; teoría microscópica de la función dieléctrica; modelo local; modelo hidrodinámico; modelo de Hopfield y Thomas.
- Polaritones de superficie: Aproximación local; estudios no-locales.
- Sistemas bidimensionales y películas delgadas: Polaritones confinados.
- Respuesta óptica local y no-local: Reflexión de luz por una superficie; reflexión de luz por sistemas multicapas.
- Efectos de campos magnéticos externos en las propiedades ópticas de superficies: Tensor dieléctrico; magnetopolaritones de superficie y volumen; respuesta óptica.
- Propiedades ópticas de magnetopolaritones en sistemas multicapas: Respuesta óptica; reflexión de luz.

BIBLIOGRAFÍA

1. J. D. Jackson, Classical Electrodynamics, 3rd edition (Wiley, 1998).
2. Electromagnetic Waves, Recent developments in research, Vol. 1, Spatial Dispersion in Solids and Plasmas (Edited by P. Halevi, North Holland, 1992).
3. M. Born & E. Wolf, Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light (Cambridge University Press, 1980).
4. Peter Y. Yu & Manuel Cardona, Fundamentals of Semiconductors (Springer, New York, 1996).
5. H. Luth, Surfaces and Interfaces of Solids, 2nd edition (Springer-Verlag, 1993).

QUÍMICA CUÁNTICA COMPUTACIONAL

OBJETIVO

Estudiar las soluciones cuánticas de la estructura electrónica de sistemas atómicos y moleculares, además de algunas de sus propiedades físicas y químicas, utilizando el programa Gaussian para ejemplificar los cálculos correspondientes.

CONTENIDO

- Funciones de Onda y operadores asociados a sistemas de muchos electrones.
- Aproximación de Hartree-Fock.
- Aproximaciones semiempíricas.
- Optimización de geometrías moleculares.
- Correlación electrónica y su tratamiento: Métodos de Interacción de Configuración (CI) y Campo Autoconsistente Multi-Configuracional (MCSCF), entre otros.
- Teoría de Funcionales de la Densidad.
- Ejemplos de aplicación en compuestos químicos de interés.

BIBLIOGRAFÍA

1. A. Szabo, N. Ostlund, Modern Quantum Chemistry (Dover, 1996).
2. J. Foresman, A. Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods (Gaussian, Inc., 2000).
3. Manuales de Gaussian 92, 94 y 98.

QUÍMICA CUÁNTICA DE SÓLIDOS

OBJETIVO

Aprender los fundamentos teóricos de los métodos de cálculo de las propiedades electrónicas de los sistemas cristalinos, así como también la utilización de algunos de los principales programas de cómputo actuales que llevan a cabo tales procedimientos.

CONTENIDO

Parte I Métodos Básicos.

- El potencial cristalino y expansiones de ondas planas.
- Teoría de electrones casi libres.
- Método de Enlace Fuerte (TB).
 - ✓ Programa de Hoffman.
 - ✓ Obtención de Propiedades: DOS, bandas, etc.
- Aproximación del Campo Cristalino.

Parte II Métodos Avanzados

- OPW.
- Teoría de los pseudopotenciales.
- Teoría de Hartree—Fock en Sólidos.
 - ✓ Programas CRYSTAL.
 - ✓ Método de la supercelda.
- La Teoría DFT en Sólidos.
 - ✓ Búsqueda Car-Parrinello.
 - ✓ Programa SIESTA.
- Métodos Híbridos.
 - ✓ Aproximaciones Muffin-tin. APW.
 - ✓ Programa LMTO.

Parte III Casos de Estudio

- Cristales Puros.
- Impurezas locales en cristales.

BIBLIOGRAFÍA

1. Quinn, Quantum Chemistry of Solids (Oxford).
2. Manuales de los programas: CRYSTAL92, Hoffman, LMTO-ASA, SIESTA y artículos allí citados.
3. Yussuff, Electronic Band Structure and its Applications (Springer).

SEMICONDUCTORES

OBJETIVO

Estudiar de los principios físicos específicos de sistemas semiconductores, con una introducción a heteroestructuras semiconductoras.

CONTENIDO

- Introducción: Semiconductores homogéneos; estadística de portadores en exceso; teoría de la unión p-n; contactos metal-semiconductor y superficies; compuestos semiconductores.
- Electrones y vibraciones de la red: Estructuras de bandas electrónicas; fonones e interacción electrón-fonón.
- Propiedades físicas de heteroestructuras: Introducción a pozos cuánticos y superredes; confinamiento cuántico de portadores y fonones.
- Sistemas de baja dimensionalidad: Sistemas bidimensionales; alambres y puntos cuánticos.

BIBLIOGRAFÍA

1. P. Y. Yu and M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors, 2nd edition (Springer-Verlag Berlin, 1999).
2. G. Bastard, Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures (John Wiley and Sons, New York, 1988).
3. Highlights in Condensed Matter Physics and Future Prospects, edited by L. Esaki, NATO ASI Series, Vol. 285 (Plenum, 1992).
4. B. K. Ridley, Quantum Processes in Semiconductors, 4th edition (Oxford University Press, New York, 1999).
5. K. Seeger, Semiconductor Physics, 7th Edition (Springer-Verlag Berlin, 1999).

SISTEMAS MESOSCÓPICOS

OBJETIVO

Dar a conocer a los estudiantes las características del transporte electrónico en sistemas mesoscópicos, nanoestructuras y sistemas de bajas dimensiones. El punto más importante del curso son los efectos cuánticos como localización de Anderson, efecto cuántico de Hall, efecto de Aharonov-Bohm, bloqueo Coulombiano, etc. El estudio de estos efectos es indispensable para entender los principios de operación de dispositivos electrónicos modernos.

CONTENIDO

- Estados electrónicos en semiconductores. Diagrama de bandas de heterouniones.
- Densidad de estados electrónicos en cero, uno, dos y tres dimensiones.
- Transporte electrónico clásico, ecuación de Boltzmann.
- Efecto de tamaño en la aproximación clásica para la conductividad de una placa metálica delgada.
- Efecto Hall clásico. Magnetoresistencia.
- Cuantización de estados electrónicos en un campo magnético. Niveles de Landau.
- El efecto de Haas-van Alfen.
- El efecto Aharonov-Bohm.
- El efecto Hall cuántico.
- Cuantización de la conductancia: Contacto puntual.
- Conductores desordenados. Localización de Anderson.
- Correcciones a la conductancia debido a la localización débil.
- Fluctuaciones de la conductancia.

BIBLIOGRAFÍA

1. S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge, 1995).
2. S.W.J. Beenakker and H. Van Houten, *Quantum Transport in Semiconductor Nanostructures in Solid State Physics*, vol. 44 (1991).
3. A.A. Abrikosov, *Introduction to the Theory of Normal Metals*, 2nd edition (1996).
4. M.J. Kelly, *Low-Dimensional Semiconductors. Materials, Physics, Technology, Devices* (Clarendon Press, Oxford, 1995).

SUPERCONDUCTORES

OBJETIVO

Aprender las propiedades fundamentales de los materiales superconductores y las teorías más importantes sobre la superconductividad.

CONTENIDO

- Fenómenos fundamentales.
- Descripción fenomenológica, ecuaciones de London.
- Teoría de Ginzburg-Landau.
- Electrones, fonones, interacción electrón-fonón.
- Teoría BCS. Consecuencias y comparación con resultados experimentales.
- Tunelamiento, efecto Josephson.
- Superconductores de alta temperatura crítica.

BIBLIOGRAFÍA

1. C.P. Poole, Jr., H.A. Farach, and R.J. Creswick, Superconductivity (Academic Press, San Diego, 1995).
2. T.P. Sheahen, Introduction to High-Temperature Superconductivity (Plenum, New York, 1994).
3. J.R. Schrieffer, Theory of Superconductivity (Benjamin/Cummings, Reading, Mass., 1983).
4. M. Tinkham, Introduction to Superconductivity (McGraw-Hill, New York, 1975).
5. J.C. Phillips, Physics of High-Tc Superconductors (Academic Press, Boston, 1989).

SUPERFICIES E INTERFACES DE MATERIALES

OBJETIVO

Dar una base formal al estudiante que le permita entender los fenómenos que ocurren en las superficies.

CONTENIDO

En este curso se tratan los siguientes tópicos especializados de la ciencia de superficies:

- Termodinámica estadística de interfaces.
- Estructura atómica de interfaces.
- Métodos experimentales en la ciencia de superficies.
- Estructura electrónica de interfaces.
- Adsorción y segregación.
- Transporte atómico y procesos de crecimiento en superficies.
- Efectos superficiales de largo alcance en sistemas semiconductores e iónicos.
- Oxidación y otras reacciones de superficie.

BIBLIOGRAFÍA

1. Desjonqueres, Spanjaard, Concepts in Surface Physics (Springer—Verlag, 1993).
2. A. Zangwill, Physics at Surface (1988).
3. M. Prutton, Intro to Surface Physics (1994).
4. J. Hudson, Surface Science (1992).
5. J.M. Blakely ed., Surface Physics of Materials (Academic, 1975).

TEORÍA DE LÍQUIDOS

OBJETIVO

Introducir al estudiante a una de las aplicaciones de la Física Estadística de gran interés y actividad actual de investigación, como lo es la teoría de líquidos, siendo ésta la teoría clásica que estudia las propiedades de fluidos densos en equilibrio. En los fluidos densos incluimos los gases muy concentrados y los líquidos.

CONTENIDO

- Revisión de termodinámica clásica: Leyes de la termodinámica; gases imperfectos; ecuaciones empíricas de estado; principio de estados correspondientes.
- Ensamblajes estadísticos: Conjunto microcanónico; conjunto canónico; conjunto gran canónico.
- Gases Imperfectos: Ecuación de estado virial; aproximación de campo promedio; diagramas de Mayer.
- Teoría de funciones de distribución: Funciones de distribución; factor de estructura; función radial de distribución; funciones de correlación; relación con los experimentos.
- Teoría de líquidos: Ecuación de Ornstein-Zernike; función de correlación directa; aproximación de Kirkwood; aproximación de Percus-Yevick; aproximación esférica media MSA; aproximación de cadena hipertejida HNC.
- Aplicaciones: Líquidos simples; soluciones iónicas; coloides; sales fundidas; fluidos no homogéneos; compósitos granulares.

BIBLIOGRAFÍA

1. D. A. McQuarrie, Statistical Mechanics (Harper & Row, 1976).
2. G. S. Rushbrook, Aspects of the Equilibrium Theory of Liquids (Escuela Latinoamericana de Física, UNAM, 1974).
3. N. T. Kovalenko & I. Z. Fisher, Methods of Integral Equations in Statistical Theory of Liquids (Dover, 1990).
4. Hansen & McDonald, Theory of Simple Liquids (Academic Press, 1990).

TERMODINÁMICA DE PROCESOS IRREVERSIBLES

OBJETIVO

Introducir al estudiante en la utilización de los conceptos generales, teorías, modelos físicos, técnicas matemáticas y aproximaciones de la Termodinámica y Física Estadística de procesos irreversibles, para proporcionarle un panorama actualizado de las principales aplicaciones de estas herramientas.

CONTENIDO

- Fundamentos de termodinámica estadística: Teorema de Liouville; teoría de ensambles; funciones de partición; potenciales termodinámicos; funciones de distribución; condiciones de equilibrio; sistemas cerrados y sistemas abiertos.
- Principios generales de la termodinámica estadística de procesos irreversibles: Termodinámica de primer orden; producción y balance de entropía; ecuaciones fenomenológicas; fuerzas y flujos termodinámicos; teorema de reciprocidad de Onsager; fluctuaciones y reversibilidad.
- Gases ideales cuánticos: Distribuciones de Bose-Einstein y Fermi-Dirac; gases cuánticos altamente degenerados; condensación de Bose-Einstein; funciones termodinámicas de sistemas de bosones y sistemas de fermiones.
- Sistemas de partículas interactivas y con estructura: Gases moleculares a baja densidad; separación de grados de libertad internos; calores específicos de sólidos; teorías de Born y de Von Karman.
- Aplicaciones generales importantes: Gases de una y varias componentes; propiedades térmicas de materiales; teoría de bandas electrónicas; gases electrónicos densos en metales; sistemas electrónicos de dimensionalidad reducida; heteroestructuras semiconductoras; coexistencia de fases en compósitos; transiciones de fase de primero y segundo orden; modelos de aleaciones; superficies e interfaces; fenómenos termoeléctricos, estados estacionarios y sistemas biológicos.

BIBLIOGRAFÍA

1. W. Yourgrau, A. Van der Merwe & G. Raw, Treatise on Irreversible and Statistical Thermophysics (Dover Publications, Inc., 1982).
2. Yu. I. Dimitrienko, Thermomechanics of composites under high temperatures (Kluwer Academic Press, 1999).
3. S. R. de Groot & P. Mazur, Non-equilibrium Thermodynamics (Dover Publications, Inc., 1984).
4. D.A. McQuarrie, Statistical Mechanics (Harper Coillins, 1976).
5. S.K. Ma, Modern Theory of Critical Phenomena, Frontiers in Physics Series (The Benjamin/Cummings Publishing Company, Advanced Book Program, 1976).
6. D. Chandler, Introduction to Modern Statistical Mechanics (Oxford University, 1987).

TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA DE MATERIALES

OBJETIVO

Conocer y aplicar la teoría de ensambles a los sistemas relevantes de la Ciencia de Materiales.

CONTENIDO

I. Fundamentos de termodinámica estadística

- ✓ CONDICIONES DE EQUILIBRIO, SISTEMAS CERRADOS Y ABIERTOS.
- ✓ Ensamblés, sistemas ergódicos.
- ✓ Ejemplos: sistemas aislados, dipolos no interactuantes.
- ✓ Funciones de distribución, factores de Gibbs y Boltzmann.
- ✓ Funciones de partición.
- ✓ Relación de las funciones de partición con las cantidades termodinámicas.
- ✓ Ejemplos: modelo de Debye, sólido de Einstein.
- ✓ Distribuciones de Fermi—Dirac y de Bose—Einstein.
- ✓ Presión, funciones de energía libre, relaciones de Maxwell.
- ✓ Funciones de energía libre y funciones de partición.
- ✓ Probabilidad para un conjunto de estados.
- ✓ Condiciones de equilibrio en términos de U , H , F , G , W .
- ✓ Fluctuaciones y elección del ensamble.

II. Aplicaciones

- ✓ Gas ideal y mezclas de gases.
- ✓ Termodinámica estadística de electrones en cristales, gas denso, metales, efectos en la estructura de bandas, semiconductores.
- ✓ Coexistencia de fases y transiciones de fases.
- ✓ Modelos de soluciones y aleaciones.
- ✓ Interfaces y superficies.
- ✓ Polímeros y soluciones de polímeros.
- ✓ Defectos puntuales en cristales.

BIBLIOGRAFÍA

Texto recomendado: Kittel & Kroemer, Thermal Physics.

Otros textos:

1. D. Chandler, Introduction to Modern Statistical Mechanics (Oxford University, 1987).
2. Hill, Introduction to Statistical Thermodynamics.
3. Gokcen, Statistical Thermodynamics of Alloys.
4. Swalin, Thermodynamics of Solids.
5. Gaskell, Metallurgical Thermodynamics.
6. C.H.P. Lupis, Chemical Thermodynamics of Materials (Prentice-Hall, 1993)