



Guía para la preparación de los exámenes de Área Área 1

Parte I

1. Principios de la termodinámica

- a. Ley cero de la termodinámica
- b. Energía térmica Q y energía mecánica W
- c. Energía interna U , Primer principio, entalpía H y ley de Hess
- d. Transformaciones isocóricas, isobáricas, isotermas e adiabáticas
- e. Entalpía de formación ΔH_f^0
- f. Ley de Kirchhoff, ciclos termodinámicos
- g. Segundo principio, entropía S y tercer principio.

(Unidad 1, 2 y 3, P. Atkins, J. Paula, *Physical Chemistry* W. H. Freeman and Company, 2010). (Unidad 1, B. Bokstein, M. Mendeleev, D. Srolovitz, *Thermodynamics and kinetics in materials*, Oxford university Press 2007). (Unidad 1, *Chemical thermodynamics of materials*, S. Stolen, T. Grande, Wiley, 2004).

2. Energía de Gibbs, ley de acción de masas, e implicaciones

- h. Cálculo de la energía de Gibbs a partir de entalpías y entropías
- i. Principio de Berthelot. Reacciones reversibles y condiciones de equilibrio
- j. Cálculo de la constante de equilibrio K
- k. Influencia de P y T : principio de Le Chatelier, ley de van't Hoff
- l. Ley de acción de masas
- m. Líquidos reales: fugacidad
- n. Función de actividad

(Unidad 3, 5 y 6, P. Atkins, J. Paula, *Physical Chemistry* W. H. Freeman and Company, 2010). (Unidad 1, 2 y 3 B. Bokstein, M. Mendeleev, D. Srolovitz, *Thermodynamics and kinetics in materials*, Oxford university Press 2007). (Unidad 1 y 3, *Chemical thermodynamics of materials*, S. Stolen, T. Grande, Wiley, 2004).

3. Potencial químico y propiedades molares parciales

- o. Propiedades extensivas
- p. Propiedades molares parciales $\bar{X}_i$
- q. Potenciales termodinámicos y relaciones de Maxwell

- r. *Potencial químico*
- s. *Teorema de Euler y relación de Gibbs-Duhem generalizada*

(Unidad 3, 4 y 5, P. Atkins, J. Paula, *Physical Chemistry* W. H. Freeman and Company, 2010). (Unidad 1, y 2 B. Bokstein, M. Mendeleev, D. Srolovitz, *Thermodynamics and kinetics in materials*, Oxford university Press 2007). (Unidad 1, *Chemical thermodynamics of materials*, S. Stolen, T. Grande, Wiley, 2004). (Unidad 5, *Chemical thermodynamics of materials*, S. Stolen, T. Grande, Wiley, 2004).

4. Diagramas de fases

- t. *Conocimiento de los grados de libertad*
- u. *Reglas de fase de Gibbs*
- v. *Diagramas (P, T) para cuerpos puros*
- w. *Diagramas binarios, regla de la palanca*
- x. *Puntos invariantes: eutécticos, peritécticos, eutectoides, peritectoides*
- y. *Diagrama Fe/C*

(Unidad 4, P. Atkins, J. Paula, *Physical Chemistry* W. H. Freeman and Company, 2010). (Unidad 4 B. Bokstein, M. Mendeleev, D. Srolovitz, *Thermodynamics and kinetics in materials*, Oxford university Press 2007). (Unidad 4, *Chemical thermodynamics of materials*, S. Stolen, T. Grande, Wiley, 2004).

5. Cinética de reacción

- z. *Cálculo de la constante de velocidad k*
- aa. *Orden de reacción*
- bb. *Orden global*
- cc. *Catalizadores e inhibidores*

(Unidad 21, P. Atkins, J. Paula, *Physical Chemistry* W. H. Freeman and Company, 2010). (Unidad 8 B. Bokstein, M. Mendeleev, D. Srolovitz, *Thermodynamics and kinetics in materials*, Oxford university Press 2007). (Unidad 5, *Chemical thermodynamics of materials*, S. Stolen, T. Grande, Wiley, 2004).

6. Leyes de Fick

- dd. *Primera ley de Fick y estado estacionario*
- ee. *Segunda ley de Fick*
- ff. *Perfiles de difusión*
- gg. *Tiempos y profundidad de difusión*
- hh. *Movilidad iónica*
- ii. *Relaciones de Einstein –Nerst y Stoke-Einstein*

(Unidad 20, P. Atkins, J. Paula, *Physical Chemistry* W. H. Freeman and Company, 2010). (Unidad 10, B. Bokstein, M. Mendeleev, D. Srolovitz, *Thermodynamics and kinetics in materials*, Oxford university Press 2007).

7. Transiciones de fase

- jj. *Clasificación de Ehrenfest*
- kk. *Transiciones de primer orden*
- ll. *Transiciones de fase continua*
- mm. *Parámetros de orden*

(Unidad 4, P. Atkins, J. Paula, *Physical Chemistry* W. H. Freeman and Company, 2010). (Unidad 2, *Guía para la preparación de Exámenes Generales. Área: Ciencia de Materiales*

Parte II

- **PROPIEDADES ESTRUCTURALES:** Red directa y red recíproca, Ley de Bragg, Factor de estructura, Energía de cohesión.
(Kittel, Cap.1-2, Gersten cap. 1 y 3)
- **PROPIEDADES MECÁNICAS:** Propiedades elásticas, esfuerzo, tensión.
(Kittel Cap 3)
- **VIBRACIONES DE LA RED CRISTALINA:** Relaciones de dispersión de una base de uno y dos átomos. Cuantización de ondas elásticas. Momento de Fonones.
(Kittel, Cap. 4; Ashcroft, Cap. 22; Burns, Cap. 12).
- **PROPIEDADES TÉRMICAS:** Teoría clásica y cuántica de la Capacidad calorífica (Modelo de Einstein y Debye).
(Kittel, Cap. 5; Ashcroft, Cap. 23; Burns, Cap. 11A)
- **ESTRUCTURA DE BANDAS ELECTRÓNICAS:** Modelos de electrones libres y en un potencial periódico.
(Kittel Cap. 6-8; Ashcroft, Cap. 8-10; Burns, Cap. 10A,10C).
- **PROPIEDADES TERMOELÉCTRICAS:** Ecuación de transporte, conductividad eléctrica y térmica.
(Kittel Cap. 6,8; Ashcroft Cap. 13)
- **PROPIEDADES ÓPTICAS:** La función dieléctrica del gas de electrones. Propagación de ondas electromagnéticas en cristales.
(Kittel, Cap. 14; Gersten cap 8, Burns, Cap. 13)
- **PROPIEDADES MAGNÉTICAS:** Diamagnetismo, Paramagnetismo y Ferromagnetismo
(Kittel, Caps. 11 y 12; Gersten Cap. 9, Ashcroft, Caps. 31, 32 y 33; Burns, Cap. 15).
- **PROPIEDADES DE SUPERCONDUCTORES:** El fenómeno de superconductividad. y Efecto Meissner. Ecuación de London. Termodinámica de la transición superconductora. Tipos de superconductores.
(Kittel, Cap. 10; Gersten Cap 16, Burns, Cap. 16).

Bibliografía:

1. Peter Atkins and Julio de Paula, W. H. Freeman and Company, New York, nine edition, 2010. *Physical Chemistry*.
2. S. Stølen & T. Grande. *Chemical Thermodynamics of Materials*.
3. Boris s. Bokstein, Mikhaili i. Mendelev; David J. Srolovitz, Oxford University Press, USA (September 1, 2005) *Thermodynamics&Kinetics in MaterialsScience*.
4. C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics, 8th Edition, Wiley & Sons, New York, 2005*.
5. J. I. Gersten and F. Smith, *The Physics and Chemistry of Materials*, New York : John Wiley & sons, 2001.
6. N.W. Aschroft and N.D. Mermin, *Solid State Physics, Holt, Rinehart and Winston, 1976*
7. G. Burns, *Solid State Physics, San Diego, CA, 1985*.

