

## TEMARIO

### **Bloque I. Termodinámica Estadística**

Tema 1. Termodinámica Estadística: Fundamentos y Sistemas de Partículas Independientes.

1. Introducción a la Termodinámica Estadística
2. Estados de un Sistema. Relación entre las Propiedades Macroscópicas y Microscópicas de un Sistema.
3. Funciones Termodinámicas en el Colectivo Canónico.
4. Propiedades e interpretación de la Función de Partición Canónica.
5. Función de Partición en Sistemas de Partículas no Interactuantes.
6. Función de Partición Molecular.
7. Propiedades Termodinámicas del Gas Ideal.

Tema 2. Termodinámica Estadística de Sistemas Reales

1. Introducción. Fuerzas Intermoleculares
2. Función de Partición Clásica
3. Gases Reales
4. Conductividad Térmica en Sólidos Cristalinos
5. Líquidos. Función de distribución Radial

Tema 3. Teoría Cinética de Gases

1. Introducción a la Teoría Cinética de Gases
2. Función de Distribución de la Velocidad
3. Velocidades Medias y más Probable
4. Función de Distribución de la Energía
5. Colisiones con las Paredes. Efusión
6. Colisiones Intermoleculares

### **Bloque II. Fenómenos de Transporte y Cinética Molecular**

Tema 4. Fenómenos de Transporte

1. Introducción a los Fenómenos de Transporte: Conductividad térmica, Viscosidad y Difusión
2. Conductividad Térmica: ley de Fourier.
3. Viscosidad: leyes de Newton y Poiseuille
4. Difusión: Primera ley de Fick
5. Tratamiento microscópico de los fenómenos de transporte en gases ideales
6. Difusión en líquidos. Segunda ley de Fick y relaciones difusión-viscosidad.

Tema 5. Cinética Molecular

1. Introducción
2. Teoría de Colisiones
3. Superficies de Energía Potencial y Dinámicas de Reacción
4. Teoría del Estado de Transición

- 4.1. Desarrollo de la TET
- 4.2. Formulación Termodinámica
- 4.3. Efectos Cinéticos Isotópicos
- 4.4. Limitaciones de la TET

### **Bloque III. Fenómenos de Superficie**

#### Tema 6. Estudio Termodinámico de la Interfase

1. Región interfacial o interfase
2. Tensión superficial
3. Interfases curvas
  - 3.1 Ecuación de Young-Laplace
  - 3.2 Presión de vapor en superficies curvas: ecuación de Kelvin
  - 3.3 Capilaridad
4. Termodinámica de superficies en sistemas multicomponente: Isoterma de adsorción de Gibbs.
5. Monocapas

#### Tema 7. Superficies Sólidas: Adsorción y Catálisis

1. Estructura y composición de superficies sólidas
2. Adsorción de gases sobre sólidos
3. Isotermas de adsorción
4. Velocidad de los procesos superficiales
5. Características de los fenómenos catalíticos
6. Mecanismos de catálisis y energía de activación
7. Características de la catálisis heterogénea
8. Etapas de la catálisis heterogénea
9. Mecanismos de catálisis heterogénea
10. Ejemplos de catálisis heterogénea

#### Tema 8. Interfases Electrizadas

1. Introducción
2. Termodinámica de la Interfase Electrizada
3. Estructura de la Interfase
  - 3.1. Modelo de Helmholtz-Perrin o de la doble capa rígida
  - 3.2. Modelo de Gouy-Chapman o de la doble capa difusa
  - 3.3. Modelo de Stern
4. Doble Capa y Coloides

### **Bloque IV. Introducción a los Polímeros**

#### Tema 9. Química Física de los Polímeros

1. Definiciones generales
2. Clasificación y tipos de polímeros
3. Distribución de pesos moleculares
4. Configuración y conformación
5. Termodinámica de polímeros en disolución

## BIBLIOGRAFÍA DE REFERENCIA

### Bibliografía básica:

- J. Bertrán y J. Núñez (coords)  
*Química Física*  
Ariel, Barcelona 2002
- I. Levine  
*Fisicoquímica (4ª ed.)*  
McGraw-Hill, Madrid 1999
- P. Atkins  
*Química Física (6ª ed.)*  
Omega, Barcelona 1999
- D. A. McQuarrie & J. D. Simons  
*Physical Chemistry. A Molecular Approach*  
University Science Books, Sausalito 1997

### Bibliografía complementaria:

- M. Díaz Peña y A. Roig Muntaner  
*Química Física*  
Ed. Alhambra, Madrid 1972
- R. S. Berry, S. A. Rice & J. Ross  
*Physical Chemistry (2ª ed.)*  
Oxford University Press, New York, 2000
- J. Bertrán, V. Branchadell, M. Moreno, M. Sodupe  
*Química Cuántica*  
Síntesis, Madrid, 2002
- A. Horta  
*Macromoléculas*  
UNED, Madrid, 1988
- L J. W. Moore and R. G. Pearson  
*Kinetics and Mechanism (3ª ed.)*  
Wiley & Sons, New York, 1981
- J. A. Rodríguez Renuncio, J. J. Ruiz Sánchez y J. S. Urieta  
*Termodinámica química*  
Síntesis, Madrid 1998
- G. Challa  
*Polymers Chemistry*  
Ellis Horwood, 1993