TERMODINÁMICA DE MATERIALES

12 CRÉDITOS

OBJETIVO

El objetivo del curso es presentar una termodinámica de materiales, con énfasis en aquellos temas y materiales relevantes a las aplicaciones modernas y de alto impacto en la innovación tecnológica. Presupone que el alumno ha cursado, al menos, un curso introductorio de termodinámica a nivel de licenciatura. Los principios que aquí se presentan se aplican a todas las formas de la materia y se planea cubrir los fundamentos macroscópicos de la termodinámica sin incidir en las propiedades estadísticas de sistemas de muchos cuerpos; cubre sistemas poliméricos, cerámicos, metálicos y de aleaciones, sistemas líquidos, así como sistemas capaces de realizar trabajo sin cambios en su volumen, tales como sistemas magnéticos, con fuerzas de superficie y otros sistemas de interés para la investigación en ciencia e ingeniería de materiales. Los fenómenos macroscópicos, de interés para los materiales, pueden ser explicados con base en su comportamiento microscópico y en este curso se enfatiza la relación entre los postulados e hipótesis de la materia macroscópica, con las propiedades microscópicas de la materia para su posterior fundamentación basado en la mecánica estadística. La temática a desarrollar se presenta en forma rigurosa y estructurada, de manera tal que se cubran completamente los fundamentos de la termodinámica de los materiales.

TEMARIO

1. Propiedades termodinámicas de materiales. (Texto: Callen Caps. 1-4) (16 horas)
   - Principios básicos de termodinámica. Ecuaciones de estado y fundamentales.
   - Capacidades caloríficas y otras segundas derivadas.
   - Potenciales termodinámicos.
   - Aplicaciones de la tercera ley de la termodinámica.
   - Relaciones de Maxwell.

2. Estabilidad y transiciones de fase. (Textos: Callen Caps. 4-8; DeHoff Cap. 5 y 7) Tester & Modell Caps. 6 y 7) (4 horas)
   - Principio de Le-Chatelier Braun generalizado.
   - Transiciones de primer y segundo orden: Ecuación de Van der Walls.
   - Ecuación de Clapeyron.
   - Regla de fases de Gibbs.
   - Nucleación y crecimiento en transiciones de fase.
   - Diagramas de sistemas unitarios heterogéneos

3. Sistemas binarios (Textos: Callen Cap. 13; DeHoff Caps.7, 8 y 11; Lupis Cap. VI) (12 horas)
   - Soluciones binarias. Ideales, diluidas, regulares, otras.
     - Gases ideales generales; mezclas
     - Gases reales. Ecuación de Van der Waals.
   - Ecuaciones de gases poco densos, métodos de expansión de Virial.
   - Reacciones químicas; diagramas de potencial
     - Estados fiduciarios, calor de reacción o formación
     - Diagramas de dominio, de Ellingham, Porbaix

4. Diagramas de fases de sistemas multicomponentes (DeHoff Caps. 9, 10; Lupis Caps VII) (12 horas)
   - Propiedades de exceso, leyes de Raoult y Henry, Fugacidad
     - Soluciones líquidas y sólidas; función y coeficiente de actividad.
     - Soluciones de polímeros y electrolitos.
   - Puntos eutécticos, peritécticos.
   - Descomposiciones espinodales y eutectoides.
   - Diagramas de sistemas ternarios y cuaternarios.
   - Puntos peritectoides, cuasiperitécticos.
   - Diagramas de fases de compuestos: cerámicos.
   - Transiciones martensíticas, de orden-desorden, vítreas.
   - Superconductores cerámicos.

3. Ciclos termodinámicos: Carnot, endorreversibles.

(Sichev Caps. 3, 4; Tester y Modell Cap. XIII) (12 horas)

   - Ciclos de máquinas modernas: Miller, Atkinson, Joules-Brayton, Ericsson, Brayton cuántico, etc.
   - Ciclos con materiales magnéticos, dieléctricos, y de efectos mixtos.
   - Modelado de ciclos híbridos.
   - Optimización de ciclos de trabajo
     - Trabajo máximo: Disponibilidad, exergía y anergía
     - Optimización con base en criterios termo-ecológicos
     - Principios de termo-economía.
   - Optimización de ciclos en tiempo real

4. Fenómenos de superficie

(DeHoff Caps. 12, 13; Lupis Cap XIII, Tester y Modell Caps. 15-17) (6 horas)

- Ecuaciones termodinámicas y equivalente mecánico.
- Efectos de curvatura sobre equilibrio de fases.
- La formas de equilibrio de cristales.
- Gráficas de Wulff y ecuación de Laplace.
- Adsorción e isotermas de Langmuir.

7. Defectos en cristales (DeHoff Caps. 13, Lupis Cap. XIII, Tester Cap. 19) (6 horas)

- Defectos puntuales, intersticiales, divacancias.
- Defectos tipo Frenkel, Schottky y combinados.
- Cristales no-estequiométricos.
- Materiales amorfos, vidrios, con impurezas.

8. Materiales complejos: sistemas eléctricos, magnéticos, etc. (Sichev Caps. 3, 4) (10 horas)

- Variables termodinámicas para sistemas complejos.
- Materiales magnéticos: diamagnéticos, paramagnéticos, ferrimagnéticos y ferromagnéticos.
- Materiales eléctricos.
- Materiales superconductores.
- Ciclos de trabajo en sistemas complejos.

9. Puntos críticos (Domb Caps. 1-3, Callen Cap. 9) (10 horas)

- Teoría clásica y teoría moderna de puntos críticos.
- Modelo de van der Waals para ($T > T_c$).
- Modelo de van der Waals para ($T \leq T_c$).
- Divergencia de Wheeler and Griffiths.
- Leyes de escalamiento, universalidad.
- Teoría de campos promedios, exponentes universales.
- Adimensionalizacón y teoría de renormalización.

BIBLIOGRAFÍA

1. Callen Herbert B., "*Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*", 2nd. Edition, J. Wiley, 1985.

2. DeHoff Robert T., *"Thermodynamics in Material Science*", 2nd. Ed., CRC Taylor and Francis, McGraw-Hill, Boca Raton, FL, USA, 2006.
3. Lupis C. H. P., *"Chemical Thermodynamics of Materials*", North-Holland, Elsevier, 1983.
4. Tester J. W. and M. Modell, "*Thermodynamics and its applications*" 3rd. Ed., Prentice-Hall PTR, Upper Saddle River, New Jersey, USA, 1997.
5. Sichev V. V., "*Complex Thermodynamic Systems*", Mir Pbls. Moscow, Russia. 1981.
6. Domb, Cyril; "*The Critical Point*", Taylor and Francis, McGraw Hill, 1996.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

1. Hudson J., "*Thermodynamics of Materials*", Volúmenes 1 y 2. John Wiley and Sons, New York, USA, 1996.
2. Price Gareth, "*Thermodynamics of Chemical Processes*", Oxford University Press, Oxford, 1998.
3. Chandler David, "*Introduction to Modern Statistical Mechanics*", Oxford Univ. Press, Oxford, UK, 1987.
4. Klotz I. M. and R. M. Rosenberg, "*Chemical Thermodynamics. Basic Theory and Methods*", 5th. Ed., John Wiley and Sons, New York, 1994.
5. Aleksishivili M. & S. Sidamonidze, "*Problems in Chemical Thermodynamics with solutions*", World Sci. Press, Singapore, 2002.
6. Devereux O. F. "*Topics in Metallurgical Thermodynamics*", J. Wiley, New York, 1993.
7. Bard A. J. and M. Stratmann, "*Thermodynamics of electrified interfaces*", Encyclopedia of Electrochemistry, Vol. 1, by E. Gilaedi and M. Urbakh, Eds., Wiley-VCH, Weinheim, Ger. 2002.
8. Doremus R. H., "*Rates of Phase Transformations*", Academic Press, San Diego, CA, USA, 1985.
9. Glazov V. M. & Pavlova L. M. "*Semiconductor & Metal Binary Systems: Phase Equilibria and Chemical Thermodynamics*", Consultant Bureau, New York, 1989.
10. Plischke M. & Bergersen B.; "*Equilibrium Statistical Physics*", 2nd. Edition, World Scientific, 1994.