

# Simulación Molecular – MÓDULO I: FUNDAMENTOS BÁSICOS

Bases físicas y químicas de la Termodinámica

## GUÍA DOCENTE



**INSTRUCCIONES PARA LA ELABORACIÓN Y TRAMITACIÓN DE LAS GUÍAS DOCENTES  
DE LAS ASIGNATURAS**

Curso Académico:	2022-2023					
Máster:	Simulación Molecular					
Denominación de la asignatura	Bases físicas y químicas de la Termodinámica					
Módulo	MÓDULO I: FUNDAMENTOS BÁSICOS					
Curso académico	2022-2023					
Tipología	Obligatoria					
ECTS	<b>Teoría:</b>	5.00	<b>Práctica:</b>	0.00	<b>Total:</b>	5.00
Periodo de impartición	Del 19 de diciembre de 2022 al 6 de febrero de 2023					
Modalidad	VIRTUAL					
Web universidad coordinadora	<a href="https://unia.es/estudiantes/actividades-academicas/todos-los-cursos/item/master-universitario-en-simulacion-molecular-3">https://unia.es/estudiantes/actividades-academicas/todos-los-cursos/item/master-universitario-en-simulacion-molecular-3</a>					
Web universidad colaboradora	<a href="http://www.uhu.es/mastersoficiales/estudios/oferta-academica/master-en-simulacion-molecular">http://www.uhu.es/mastersoficiales/estudios/oferta-academica/master-en-simulacion-molecular</a>					
Idiomas de impartición	Español					

<b>Profesorado</b>			
<b>Nombre y apellidos</b>	<b>Email</b>	<b>Universidad</b>	<b>Créditos</b>
Felipe Jiménez Blas		UNIVERSIDAD DE HUELVA	3.00
Julio Largo Maeso		UNIVERSIDAD DE CANTABRIA	2.00
<b>TUTORIAS (Coordinador/a de asignatura): Horario y localización</b>			
Aula Virtual de la UNIA <a href="https://unia.adobeconnect.com/tutoriasimulacionmolecular">https://unia.adobeconnect.com/tutoriasimulacionmolecular</a>			
<b>COMPETENCIAS</b>			
Básicas y Generales	CG1: Comprender, analizar, evaluar y seleccionar teorías científicas adecuadas y metodologías precisas para formular juicios a partir de los datos disponibles, bien sean experimentales y/o teóricos, en los ámbitos de la Termodinámica, la Mecánica Estadística y la Simulación Molecular.  CG2: Demostrar dominio en la utilización de bibliografía científica		

	<p>y bases de datos, así como en el análisis de documentos científicotécnicos, en los ámbitos de la Termodinámica, la Mecánica Estadística y la Simulación Molecular.</p> <p>CG3: Comprender y ser capaz de elaborar informes, presentaciones y/o publicaciones científicas en el ámbito de la Simulación Molecular.</p> <p>CG4: Comprender y ser capaz de concebir y planificar un proceso de investigación en el ámbito de la Simulación Molecular.</p> <p>CB6: Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.</p> <p>CB7: Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.</p> <p>CB8: Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.</p> <p>CB9: Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.</p> <p>CB10: Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.</p>
<p>Transversales</p>	<p>CT2: Utilizar de manera avanzada las tecnologías de la información y la comunicación.</p> <p>CT3: Gestionar la información y el conocimiento.</p> <p>CT4: Comprometerse con la ética y la responsabilidad social comocidadano y como profesional.</p> <p>CT5: Definir y desarrollar el proyecto académico y profesional.</p> <p>CT6: Sensibilización en temas medioambientales.</p>
<p>Específicas</p>	<p>CE6: Comprender las leyes macroscópicas físicas y químicas de sistemas en condiciones de equilibrio: propiedades termodinámicas y equilibrio de fases de sustancias puras y</p>

mezclas.

CE7: Comprender los principios fundamentales de la Mecánica Estadística de equilibrio y no equilibrio, incluyendo propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas.

CE11: Saber escribir, sintetizar, presentar los resultados científicos en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones.

### RESULTADOS DE APRENDIZAJE

1. Conocer los conceptos básicos, definiciones y magnitudes más relevantes de la Termodinámica.
2. Ser capaz de aplicar los dos primeros principios de la Termodinámica.
3. Conocer y utilizar la ecuación fundamental de la Termodinámica.
4. Relacionar las diferentes representaciones con las que se puede describir el estado termodinámico de un sistema macroscópico.
5. Reconocer los diferentes elementos que conforman un diagrama de fases.
6. Ser capaz de utilizar la regla de las fases de Gibbs, incluyendo en caso de sistemas reactivos.
7. Conocer la ecuación de van der Waals y relacionarla con el principio de los estados correspondientes.
8. Identificar las principales funciones de mezclas termodinámicas y el comportamiento de las mezclas ideales.

### CONTENIDOS

#### Descriptores

Primer Principio de la Termodinámica. Segundo Principio de la Termodinámica. Formulaciones alternativas de la Termodinámica. Regla de las fases de Gibbs. Diagramas de fase. Equilibrio de fase de sistemas puros y mezclas

#### Temario

Tema 1. Conceptos básicos y definiciones. El sistema y el exterior. Tipos de paredes y ligaduras. Paredes adiabáticas. Sistemas simples y sistemas compuestos. Estado termodinámico. Estados de equilibrio. Procesos termodinámicos. Propiedades derivadas.

Tema 2. Primer principio de la Termodinámica. Trabajo. Calor. Energía interna. Primer principio de la Termodinámica. Aplicaciones del primer principio. Ecuación del gas ideal.

Tema 3. Segundo principio de la Termodinámica. Procesos cuasiestáticos. Procesos reversibles e irreversibles. Máquinas térmicas. El teorema de Clausius. El ciclo de Carnot. Entropía. Ecuación fundamental de la Termodinámica. Ecuación de Euler. Relación de Gibbs-Duhem.

Tema 4. El formalismo termodinámico. Postulados de la Termodinámica. Representación energética. Principio extremal de la energía. Representación entrópica. Principio extremal de la entropía. Propiedades extensivas e intensivas. Transformadas de Legendre. Formulaciones de la Termodinámica alternativas. Relaciones de Maxwell. Método de los jacobianos.

Tema 5. Criterios de estabilidad. Introducción. El criterio de estabilidad. Sustancias puras. Sistemas binarios. Sistemas ternarios. Estados críticos.

Tema 6. Equilibrio de fase y estabilidad. Transiciones de fase de primer orden. Discontinuidad del volumen: regla de la palanca. Discontinuidad de la entropía: calor latente. Estados metaestables. Ecuación de Clausius-Clapeyron. Regla de las fases de Gibbs. Diagramas de fase. Componentes puros. Mezclas binarias.

Tema 7. Aplicaciones a sistemas puros y mezclas. Ecuación de van der Waals. Principio de los estados correspondientes. Ecuaciones de estado PVTN para fluidos. Relaciones PVTN para mezclas. Propiedades de mezcla. Mezclas de gases ideales y disoluciones ideales. Reacciones químicas y equilibrio químico. Grado de reacción. Reacciones simultáneas. Calor de reacción. Estabilidad y principio de Le Châtelier. Regla de las fases de Gibbs para sistemas químicos. Reacciones químicas en gases ideales.

**ACTIVIDADES FORMATIVAS Y METODOLOGÍAS DOCENTES**

Véase actividades formativas

<b>Actividad formativa</b>	<b>Modalidad de enseñanza</b>	<b>Dedicación</b> (horas de trabajo autónomo del estudiante)	<b>Dedicación</b> (horas de trabajo del estudiante con apoyo del profesor)
AF1-Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	VIRTUAL	35	35
AF2. Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	VIRTUAL	15	15
AF3. Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	VIRTUAL	25	0

**SISTEMA DE EVALUACIÓN**

Véase estrategias/metodologías de evaluación.

**OBSERVACIONES**

**Estrategias/metodologías de evaluación**

**Porcentaje de valoración sobre el total**

Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (Adobe Connect) y Campus Virtual (Moodle) (uso del chat, foros, e-mail, etc.)	0-20%%
Realización de problemas y/o programas computacionales, por escrito, sobre los contenidos de la asignatura	20-40%%
Pruebas escritas de evaluación mediante el uso del Campus Virtual (Moodle)	30-50%%
Resolución de cuestionarios y tests de evaluación a través del Campus Virtual (Moodle)	10-30%%
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	
<p>1. H. B. Callen, Termodinámica (Ed. AC, Madrid, 1981).</p> <p>2. J. W. Tester y M. Modell, Thermodynamics and Its Applications (Prentice Hall, New Jersey, 1997).</p>	
<b>PLAN DE CONTINGENCIA</b>	
No procede, ya que la enseñanza es VIRTUAL.	

Conforme a lo dispuesto en la legislación vigente en materia de protección de datos de carácter personal (Reglamento (UE) 2016/679, de 27 de abril) le informamos que los datos personales que nos ha facilitado pasarán a ser tratados por la UNIVERSIDAD INTERNACIONAL DE ANDALUCÍA como responsable del tratamiento, siendo órgano competente en la materia la Dirección del Área de Gestión Académica (Monasterio Santa María de las Cuevas, C/ Américo Vespucio nº2, Isla de La Cartuja - 41092 - Sevilla) ante quien Ud. puede ejercitar sus derechos de acceso, rectificación, limitación, oposición o portabilidad señalando concretamente la causa de su solicitud y acompañando copia de su documento acreditativo de identidad. La solicitud podrá hacerse mediante escrito en formato papel o por medios electrónicos.

Caso de no obtener contestación o ver desestimada su solicitud puede dirigirse al Delegado de Protección de Datos de la Universidad (rgpd@unia.es Tfno 954 462299) o en reclamación a la Agencia Española de Protección de Datos a través de los formularios que esa entidad tiene habilitados al efecto y que son accesibles desde su página web: <https://sedeagpd.gob.es>

Como responsable, la Universidad le informa que exclusivamente tratará los datos personales que Ud. le facilite para dar cumplimiento a los siguientes fines:

- a) Gestión académica y administrativa de:
  - Participación en procesos de acceso y admisión a las enseñanzas oficiales (Grado, Máster y Doctorado) o de formación Continua de la Universidad Internacional de Andalucía.
  - Inscripción y/o matrícula como alumno en cualquiera de las titulaciones oficiales (Grado, Máster y Doctorado), Formación Continua u otras actividades académicas ofrecidas por la Universidad Internacional de Andalucía.
- b) Participación en convocatorias de becas y ayudas al estudio de la Universidad Internacional de Andalucía, la Admón. General del Estado o la de las Comunidades Autónomas y de otras entidades públicas o privadas.
  - Participación en convocatorias de programas de movilidad de carácter nacional o internacional.
  - Obtención y expedición de títulos oficiales, títulos propios y otros títulos académico
- c) Gestión de su participación como estudiante en prácticas y actividades formativas nacionales o internacionales en instituciones, empresas, organismos o en otros centros.
- c) Utilización de servicios universitarios como obtención del carné universitario, bibliotecas, actividades deportivas u otros.

La Universidad se encuentra legitimada para tratar estos datos al ser necesarios para la ejecución de la relación jurídica establecida entre Ud. y la Universidad y para que ésta pueda cumplir con sus obligaciones legales establecidas en la Ley Orgánica 6/2001, de Universidades.

Usted responde de la veracidad de los datos personales que ha proporcionado a la Universidad y de su actualización.

La Universidad comunicará los datos personales que sean indispensables, y nunca en otro caso, a las siguientes categorías de destinatarios:

- A otras Administraciones y organismos públicos para el ejercicio de las competencias que les sean propias y compatibles con las finalidades arriba enunciadas (Así - a modo enunciativo y no limitativo - a Ministerios con competencias en educación y ciencia, a otras administraciones, a otras Universidades o Centros formativos equivalentes para la gestión de traslados, a empresas para la realización de prácticas)
- A entidades bancarias para la gestión de pagos y cobros.
- A organismos públicos o privados en virtud de la celebración de convenios de colaboración o contratos, conforme a lo dispuesto en la legislación vigente en materia de Protección de Datos.
- A los servicios de la propia Universidad que sean adecuados para gestionar la utilización de los servicios universitarios ofertados.

Sus datos de carácter personal se tratarán y conservarán por la Universidad conforme a la legislación vigente en materia de protección de datos, pasando luego a formar parte -previo expurgo- del Archivo Histórico Universitario conforme a lo dispuesto en la legislación sobre Patrimonio Histórico.

La Universidad sólo prevé la transferencia de datos a terceros países en el caso de su participación como alumno en alguno de los programas de formación o becas de carácter internacional. La transferencia se realizará siguiendo las directrices establecidas al respecto por el Reglamento Europeo de Protección de Datos y normativa de desarrollo.

El Servicio de Protección de Datos de la Universidad Internacional de Andalucía cuenta con una página en la que incluye legislación, información y modelos en relación con la Protección de Datos Personales a la que puede acceder desde el siguiente enlace: <https://www.unia.es/protecciondatos>