

BÁSICAS

	UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERIA DE MATERIALES		
MAESTRÍA EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES			
Programa de la actividad académica Estructura de los Materiales			
Clave	Semestre 1 o 2	Créditos 12	Básica
Modalidad	Curso(X) Taller () Lab () Sem ()	Tipo	T (X) P () T/P ()
Carácter	Obligatorio () Optativo () Obligatorio E (X) Optativo E ()	Horas	
Duración del programa	Semestral	Semana	Semestre
		Teóricas 6	Teóricas 96
		Prácticas 0	Prácticas 0
		Total 6	Total 96
Seriación Ninguna (X) Obligatoria ()			
Actividad académica anterior			
Actividad académica subsecuente			
Indicativa ()			
Actividad académica anterior			
Actividad académica subsecuente			
Objetivo general: El alumno aprenderá los conceptos matemáticos básicos sobre la simetría cristalina y su aplicación a través de la difracción, así como a utilizar las diversas técnicas de difracción en el estudio de los materiales. Dichos contenidos están dirigidos a alumnos de diversas disciplinas como la física, ingeniería, química y otras áreas afines.			
Índice temático			
	Tema	Horas semestre	
		Teóricas	Prácticas
1	Simetría Cristalina	40	0
2	Difracción De Rayos-X	20	0
3	Otras técnicas de difracción	16	0
4	Casos Prácticos	20	0

		Total	96	0
		Suma total de horas	96	
Contenido Temático				
	Tema y subtemas			
1	<p>Simetría Cristalina</p> <p>1.1 Aspectos fundamentales de teoría de grupos</p> <p>1.1.1 Concepto de grupo</p> <p>1.1.2 Clases conjugadas</p> <p>1.1.3 Subgrupo, subgrupo invariante, grupo factor</p> <p>1.1.4 Isomorfismo, homomorfismo.</p> <p>1.1.5 Aplicación a grupos puntuales cristalográficos</p> <p>a. Grupos espaciales</p> <p>1.2.1 Grupos traslacionales</p> <p>1.2.2 Sistemas cristalinos</p> <p>1.2.3 Redes de Bravais</p> <p>1.2.4 Representación de los grupos de traslaciones</p> <p>1.2.5 Red recíproca</p> <p>1.2.6 Representaciones de grupos</p> <p>b. Clasificación de grupos espaciales</p> <p>1.3.1 Nomenclatura</p> <p>1.3.2 Grupos no simórficos (planos de deslizamiento, ejes helicoidales)</p> <p>1.3.3 Tablas internacionales (estructuras cristalinas, casos particulares)</p> <p>c. El estado cristalino</p> <p>1.4.1 Introducción: estados ordenados y desordenados.</p> <p>1.4.2 Índices de Miller</p> <p>1.4.3 Poliedros de coordinación</p> <p>1.4.4 Empaquetamientos: <i>hcp</i> y <i>ccp</i></p> <p>1.4.5 Sitios intersticiales: tetraédricos y octaédricos</p>			

2	<p>Difracción de Rayos-X</p> <p>2.1 Introducción</p> <p>2.1.1 Naturaleza y propiedades de los rayos-x.</p> <p>2.1.2 Fundamentos de difracción, reflexión, dispersión e interferencia.</p> <p>2.1.3 Producción de rayos-x. Longitudes de onda características.</p> <p>2.2. Geometría de la difracción</p> <p>2.2.1 La ley de Bragg</p> <p>2.2.2 La esfera de Ewald,</p> <p>2.2.3 Exploración del espacio recíproco en el patrón de difracción de cristal único.</p> <p>2.2.4 Métodos de difracción en policristales. Geometría Bragg-Bretano y otras configuraciones.</p> <p>2.2.5 Indexación de difractogramas, manual y asistida por computadora</p> <p>2.3 Factores que intervienen en la intensidad de la difracción</p> <p>2.3.1 El factor de estructura. El problema de las fases.</p> <p>2.3.2 Extinciones sistemáticas</p> <p>2.3.3 El factor de Lorentz-polarización.</p> <p>2.3.4 El factor multiplicidad.</p> <p>2.3.5 Factores de absorción y temperatura.</p>
3	<p>Otras técnicas de difracción</p> <p>3.1 Difracción, de electrones, conceptos básicos de microscopía electrónica.</p> <p>3.2 La radiación sincrotrón, particularidades y uso de la técnica.</p> <p>3.2 La difracción de neutrones.</p>
4	<p>Casos Prácticos</p> <p>4.1 Estudio de estructuras tipo.</p> <p>4.2 Determinación del grupo puntual y de espacio.</p> <p>4.3 Determinación del tamaño de cristalito y micro-deformaciones: ecuación de Scherrer , de Stokes, Método de Williamson-Hall</p> <p>4.4 Determinación de la textura cristalina, figuras de polo y función de distribución de orientaciones</p> <p>4.5 Defectos cristalinos y su influencia en la difracción.</p> <p>4.5.1 Interpretación y recolección de datos de rayos X de cristal único (Método directo y/o método de Patterson)</p>
Estrategias didácticas	
Evaluación del aprendizaje	
Exposición	Exámenes parciales
	X

Trabajo en equipo		Examen final	X
Lecturas	X	Trabajos y tareas	X
Trabajo de investigación		Presentación de tema	X
Prácticas (taller o laboratorio)		Participación en clase	
Prácticas de campo		Asistencia	X
Aprendizaje por proyectos		Rúbricas	
Aprendizaje basado en problemas		Portafolios	
Casos de enseñanza		Listas de cotejo	
Otras (especificar)		Otras (especificar)	
Línea de investigación: Ciencia e Ingeniería de Materiales			
Perfil profesigráfico			
Grado	Maestro en Ciencia e Ingeniería de Materiales		
Experiencia docente	Conocimiento en el área de Ciencia e Ingeniería de Materiales		
Otra característica			
Bibliografía básica:			
<ol style="list-style-type: none"> 1. <i>Band Theory of Solids: An introduction from the point of view of symmetry</i>, Simon L. Altmann. Oxford University Press. 1991. 2. Burns G. and Glazer A.M., <i>Space Groups for Solid State Scientists</i>, Academic Press, 1990. 3. Cowley J., <i>Electron Diffraction Techniques</i>, Oxford Science Pub., 1992. 4. Cullity B. D., <i>Elements of X-Ray Diffraction</i>, 1978. 9 Wyckoff R.W., <i>Crystal Structures</i>, 2nd. Edition, Interscience Pub., 1966. – 5. Giacovazzo C., Monaco H.L., Viterbo D., Scordari F., Gilli G., Zanotti G., Catti M., <i>Fundamentals of Crystallography</i>, Oxford University Press, 1992. 6. Maureen M. Julian. <i>Foundations of Crystallography with Computer Applications</i>, Second Edition, Taylor&Francis Group, 2015. 7. Pecharsky V. K. and Zavalij P. Y., <i>Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials</i>, Springer Science+Business Media Inc., NY, USA, 2005. 8. <i>Powder diffraction: Theory and Practice.</i>- Edited by Robert E. Dinnebier and Simon J.L. Billinge RSC Publishing 2008. 9. Richard J.D. <i>Crystals and Crystal Structures</i>, John Wiley & Sons Ltd, 2006. 10. <i>Symmetry Relationships between Crystals Structures. Applications of Crystallographic Group theory in Crystal Chemistry.</i> Ulrich Müller. Oxford University Press, 2013. 11. <i>X-Ray Diffraction by Polycrystalline Materials</i>, Rene Guinebretiere ISTE Ltd 2007 12. <i>X-Ray Diffraction for Materials Research: From Fundamentals to Applications</i>, M. Lee. Apple Academic Press 2016. 			

Bibliografía complementaria:

1. *International Tables of Crystallography*, Volume A, IUCr, Springer. International Tables for Crystallography, Volume A: Space-group symmetry, International Union of Crystallography. Springer.
2. Glazer A.M., Hilger A., *The Structure of Crystals*, England, 1987.
3. Hyde B. G., *Inorganic Crystal Structure*,. Wiley and Sons, 1989.
4. Jackson A. G., *Handbook of Crystallography*. Springer-Verlag, New York, 1991.
5. Ladd M.F.C and Palmer R.A., *Structure Determination by X-ray Cristallography*, Plenum Press, New York, 1993. .
6. West A. R., *Solid State Chemistry and its Applications*, Wiley, 2000.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIA
E INGENIERIA DE MATERIALES



MAESTRÍA EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

Programa de la actividad académica				Química de los Materiales			
Clave	Semestre 1 o 2	Créditos 12	Básica				
Modalidad	Curso(X) Taller () Lab () Sem ()			Tipo	T (X)	P ()	T/P ()
Carácter	Obligatorio () Optativo ()			Horas			
	Obligatorio E (X) Optativo E ()						
Duración del programa		Semestral		Semana		Semestre	
				Teóricas 6		Teóricas 96	
				Prácticas 0		Prácticas 0	
				Total 6		Total 96	
Seriación							
Ninguna (X)							
Obligatoria ()							
Actividad académica anterior							
Actividad académica subsecuente							
Indicativa ()							
Actividad académica anterior							
Actividad académica subsecuente							

Objetivo general:			
El alumno adquirirá los conceptos básicos de los diferentes modelos atómicos, así como una de las posibles divisiones de los materiales y sus diferentes propiedades. Además conocerá ejemplos de materiales con sus posibles aplicaciones.			
Índice temático			
	Tema	Horas semestre	
		Teóricas	Prácticas
1	Fundamentos	40	0
2	Aplicaciones	56	0
Total		96	0
Suma total de horas		96	
Contenido Temático			

Tema y subtemas			
1	Fundamentos		
	<p>a. Enlace químico. Tipos de enlace: iónico, covalente, metálico. Fuerzas de interacción: dipolo-dipolo, dipolo inducido-dipolo inducido, Fuerzas de dispersión de London/Fuerzas de van der Waals, puentes de hidrógeno. Modelos de enlace químico: hibridación, orbitales moleculares, TRPECV.</p> <p>b. Equilibrio Químico. Tipos de enlace: iónico, covalente, metálico. Fuerzas de interacción: dipolo-dipolo, dipolo inducido-dipolo inducido, Fuerzas de dispersión de London/Fuerzas de van der Waals, puentes de hidrógeno. Modelos de enlace químico: hibridación, orbitales moleculares, TRPECV.</p> <p>c. Cinética Química. Cinética de reacciones: orden de reacción, velocidad de reacción, molecularidad de una reacción, activación térmica, ecuación de Arrhenius, teoría de colisiones, teoría del estado de transición. Difusión: Mecanismos, leyes de Fick.</p>		
2	Aplicaciones		
	<p>2.1 Materiales poliméricos. Compuestos orgánicos: nomenclatura, alcanos, alquenos, alquinos, aromáticos, grupos funcionales. Polímeros: estructura, composición, síntesis y aplicaciones. Bioquímica: aminoácidos, péptidos y proteínas, lípidos, ácidos nucleicos, biosíntesis de proteínas. Propiedades y ejemplos, polímeros y materiales funcionales.</p>		
	<p>2.2 Materiales metálicos. Teoría de bandas: metales, aislantes y semiconductores. Brecha de energía prohibida, envenenamiento y dispositivos, por ejemplo: celdas solares, LEDs, detectores, etc.</p>		
<p>2.3 Materiales cerámicos. Ejemplos de materiales cristalinos y sus aplicaciones, e.g. zeolitas, silicatos, polímeros de coordinación etc. Ejemplos de materiales amorfos, vidrios inorgánicos: óxidos, silicatos, metales, carbones. Soluciones acuosas.</p>			
Estrategias didácticas		Evaluación del aprendizaje	
Exposición		Exámenes parciales	X
Trabajo en equipo		Examen final	X
Lecturas	X	Trabajos y tareas	X
Trabajo de investigación		Presentación de tema	
Prácticas (taller o laboratorio)		Participación en clase	X
Prácticas de campo		Asistencia	
Aprendizaje por proyectos		Rúbricas	
Aprendizaje basado en problemas		Portafolios	
Casos de enseñanza		Listas de cotejo	
Otras (especificar)		Otras (especificar)	
Línea de investigación: Ciencia e Ingeniería de Materiales			

Perfil profesiográfico	
Grado	Maestro en Ciencia e Ingeniería de Materiales
Experiencia docente	Conocimiento en el área de Ciencia e Ingeniería de Materiales
Otra característica	
Bibliografía básica:	
<p>1.-<i>General Chemistry: Principles, Patterns, and Applications</i>. Saylor Foundation, 2011. [A free online textbook]</p> <p>2.-Shackelford, J. <i>Introduction to Materials Science for Engineers</i>. 6th edition. Upper Saddle River, NJ: Pearson, 2004. ISBN: 9780131424869.</p> <p>Chapter 3, "Crystalline Structure"</p> <p>Chapter 4, "Crystal Defects."</p> <p>Chapter 5, "Diffusion."</p> <p>Chapter 9, "Phase Diagrams."</p> <p>Chapter 12, "Ceramics and Glasses."</p> <p>Chapter 13, "Polymers."</p>	
Bibliografía complementaria:	
<p>1.-Atkins, P. and DePaula, <i>Physical Chemistry J</i>. 8th ed., Oxford University Press</p> <p>2.-William D. Callister, Jr. <i>Materials Science and Engineering, An Introduction</i>, 7th ed., John Wiley and Sons, Inc.</p>	



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIA
E INGENIERIA DE MATERIALES



MAESTRÍA EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

Programa de la actividad académica **Estructura Electrónica de Materiales**

Clave	Semestre 1 o 2	Créditos 12	Básica			
Modalidad	Curso(X) Taller () Lab () Sem ()	Tipo		T (X)	P ()	T/P ()
Carácter	Obligatorio ()	Optativo ()		Horas		
	Obligatorio E (X)	Optativo E ()				
Duración del programa		Semestral		Semana		Semestre
				Teóricas 6		Teóricas 96
				Prácticas 0		Prácticas 0
				Total 6		Total 96
Seriación						
Ninguna (X)						
Obligatoria ()						
Actividad académica anterior						
Actividad académica subsecuente						
Indicativa ()						
Actividad académica anterior						
Actividad académica subsecuente						

Objetivo general:

El alumno adquirirá conocimientos sobre la visión moderna de la estructura electrónica de los materiales. A diferencia de los cursos tradicionales del estado sólido, donde se hace énfasis en la teoría del electrón libre o la teoría de bandas en un material cristalino perfecto invocando el concepto del espacio recíproco, en el presente curso se hará énfasis en el espacio real como un enfoque complementario en el que se pueden tratar tanto los defectos electrónicos como las propiedades de materiales amorfos, además de los cristalinos. De esta manera, el alumno obtendrá una metodología versátil y más útil para entender la estructura electrónica de los materiales. Siendo este enfoque más cercano a la concepción química de la descripción de sistemas electrónicos (moleculares y extendidos), favorecerá la correlación rápida entre los conocimientos de los alumnos egresados de las licenciaturas de física, química e ingeniería y el contenido del curso.

Índice temático

	Tema	Horas semestre
--	------	-------------------

		Teóricas	Prácticas
1	Introducción	8	0
2	La molécula diatómica	8	0
3	Sistemas finitos e infinitos	12	0
4	Sistemas bidimensionales y tridimensionales	12	0
5	Brechas de energía	8	0
6	Enlace s-p: el caso del silicio	6	0
7	Teoría del electrón libre	10	0
8	Propiedades de los metales dentro de la aproximación del electrón libre	12	0
9	Metales de transición	12	0
10	Introducción a la teoría cuantitativa moderna	4	0
11	Más allá de la teoría de bandas: Tratamiento informativo de temas actuales (NOTA: Este capítulo no debe incluirse en el examen final de la actividad académica ni en el examen disciplinario.)	4	0
Total		96	0
Suma total de horas		96	
Contenido Temático			
	Tema y subtemas		
1	Introducción 1.1. Revisión de algunos conceptos matemáticos asociados a la Mecánica Cuántica: bras y kets 1.2. El átomo de hidrógeno 1.3. Metales, semiconductores y aislantes		
2	La molécula diatómica 2.1. La molécula diatómica homonuclear: la molécula de hidrógeno 2.2. La molécula diatómica heteronuclear 2.3. Electronegatividad 2.4. Energía de enlace y orden de enlace		
3	Sistemas finitos e infinitos 3.1. Cadenas moleculares y el espacio k 3.2. Orden de enlace en un sistema infinito 3.3. Densidad de estados local y total 3.4. Bandas de energía y energía de enlace 3.5. El teorema de los momentos 3.6. La aleación binaria		
4	Sistemas bidimensionales y tridimensionales 4.1. El sólido visto como una molécula gigante 4.2. La red cuadrada 4.3. La red cúbica 4.4. Las zonas de Brillouin para las redes fcc y bcc 4.5. La ecuación de movimiento para un electrón bajo la presencia de un campo externo 4.6. El concepto de hueco		

	<p>4.7. La superficie de Fermi</p> <p>4.8. La densidad de estados en cristales bidimensionales y tridimensionales</p> <p>4.9. La matriz de densidad, orden de enlace y la energía de enlace</p> <p>4.10. El teorema de los momentos aplicado a los cristales bidimensionales y tridimensionales</p>
5	<p>Brechas de energía</p> <p>5.1. La cadena infinita con dos estados s por átomo</p> <p>5.2. Brechas de energía en una cadena lineal de una aleación binaria</p> <p>5.3. Distorsiones de Peierls</p> <p>5.4. Metales, aislantes y el enlace metálico</p>
6	<p>Enlace s-p: el caso del silicio</p> <p>6.1. Enlace s-p entre dos átomos de silicio</p> <p>6.2. Dependencia angular de las integrales de saltos asociados a los enlaces s-p y p-p</p> <p>6.3. Híbridos sp</p> <p>6.4. Modelos simples de la estructura electrónica del silicio con coordinación tetraédrica</p> <p>6.5. Estructura de bandas del silicio empleando una base atómica mínima</p> <p>6.6. Orden de enlace y energía de enlace en el silicio empleando una base atómica mínima</p>
7	<p>Teoría del electrón libre</p> <p>7.1. Aproximación del electrón libre</p> <p>7.2. Electrones dentro de una caja</p> <p>7.3. Densidad de estados</p> <p>7.4. Bandas de energía en las aproximaciones del electrón libre y calculadas a partir de la combinación lineal de orbitales atómicos</p> <p>7.5. Modelo del electrón casi libre</p> <p>7.6. Pseudopotenciales</p> <p>7.7. Apantallamiento</p> <p>7.8. Correlación e intercambio</p>
8	<p>Propiedades de los metales dentro de la aproximación del electrón libre</p> <p>8.1. Estadística de Fermi-Dirac</p> <p>8.2. Potencial de contacto</p> <p>8.3. Calor específico electrónico</p> <p>8.4. Conductividad eléctrica</p> <p>8.5. Conductividad térmica</p> <p>8.6. La ley de Wiedeman-Franz</p> <p>8.7. Efecto Hall</p> <p>8.8. Energía de cohesión en metales simples</p> <p>8.9. Diferencias energéticas estructurales</p>
9	<p>Metales de transición</p> <p>9.1. El modelo de Friedel</p> <p>9.2. Potenciales de Finnis-Sinclair</p> <p>9.3. Enlaces d-d</p> <p>9.4. Estructura cristalina en la familia de los metales de transición</p> <p>9.5. Enlace en las aleaciones metálicas</p>
10	<p>Introducción a la teoría cuantitativa moderna</p> <p>10.1. La aproximación de Born-Oppenheimer</p>

	10.2. Bosquejo de la teoría de la funcional de densidad 10.3. Algunas aplicaciones		
11	Más allá de la teoría de bandas: Tratamiento informativo de temas actuales (NOTA: Este capítulo no debe incluirse en el examen final de la actividad académica ni en el examen disciplinario.) 11.1. Electrones en materiales no cristalinos 11.2. La brecha energética en el silicio amorfo 11.3. Localización electrónica 11.4. Polarones 11.5. Localización de Anderson 11.6. Transición metal-aislante 11.7. Superconductividad 11.8. Magnetismo 11.9. Cuasicristales		
Estrategias didácticas		Evaluación del aprendizaje	
Exposición		Exámenes parciales	X
Trabajo en equipo		Examen final	X
Lecturas	X	Trabajos y tareas	X
Trabajo de investigación		Presentación de tema	
Prácticas (taller o laboratorio)		Participación en clase	X
Prácticas de campo		Asistencia	
Aprendizaje por proyectos		Rúbricas	
Aprendizaje basado en problemas		Portafolios	
Casos de enseñanza		Listas de cotejo	
Otras (especificar)		Otras (especificar)	
Línea de investigación: Ciencia e Ingeniería de Materiales			
Perfil profesiográfico			
Grado	Maestro en Ciencia e Ingeniería de Materiales		
Experiencia docente	Conocimiento en el área de Ciencia e Ingeniería de Materiales		
Otra característica			
Bibliografía básica:			
1. Ashcroft N.W. and Mermin N.D., Solid State Physics, Holt-Saunders International Editions, 1975.			
2. Harrison W.A., Electronic Structure and the Properties of Solids, Dover Publications, 1989.			
3. Ibach H. and Lüth H., Solid State Physics, 3th. edition, Springer Verlag, 1993			
4. Sutton A.P., Electronic Structure of Materials, 1st. Edition, Oxford Science Pub., 1994.			
Bibliografía complementaria:			
1. Kittel C., Introduction to Solid State Physics, John Wiley & Sons, 6th. edition, 1986.			
2. Mckelvey J.P., Física del Estado Sólido y de Semiconductores, Editorial Limusa, 1980.			
3. Ziman J. M., Principles of the Theory of Solids, Cambridge University Press, 2nd. Edition, 1972.			



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIA
E INGENIERIA DE MATERIALES



MAESTRÍA EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

Programa de la actividad académica **Mecánica de Medios Continuos**

Clave	Semestre 1 o 2	Créditos 12	Básica			
Modalidad	Curso(X) Taller () Lab () Sem ()	Tipo	T (X)	P ()	T/P ()	
Carácter	Obligatorio ()	Optativo ()	Horas			
	Obligatorio E (X)	Optativo E ()				
Duración del programa	Semestral		Semana		Semestre	
			Teóricas 6		Teóricas 96	
			Prácticas 0		Prácticas 0	
			Total 6		Total 96	
Seriación						
Ninguna (X)						
Obligatoria ()						
Actividad académica anterior						
Actividad académica subsecuente						
Indicativa ()						
Actividad académica anterior						
Actividad académica subsecuente						

Objetivo general:			
El alumno conocerá los fundamentos que le permitirán trabajar en el área de Mecánica Aplicada y Materiales Complejos, adquiriendo de manera unificada la teoría que describe el comportamiento de fluidos y sólidos.			
Conocerá las bases matemáticas necesarias para desarrollar la teoría de medios continuos, además de los conceptos de cinemática y dinámica de un medio continuo, así como algunas ecuaciones constitutivas para sólidos y fluidos.			
Índice temático			
	Tema	Horas semestre	
		Teóricas	Prácticas
1	Antecedentes matemáticos [Bibliografía 3, 4 y 5]	16	0
2	Cinemática del medio continuo [Bibliografía 2, 6]	16	0

3	Dinámica del medio continuo [Bibliografía 2 Cap. 3; Bibliografía 6, Cap. 1,]	12	0
4	Ecuaciones constitutivas [Bibliografía 7, Caps. 4 y 5; Bibliografía 10 Cap. 6]	10	0
5	Elasticidad lineal [Bibliografía 2, Cap. 6; Bibliografía 5, Cap. 9;]	14	0
6	Análisis lineal de mecánica de fluidos [Bibliografía 2, Cap.7; Bibliografía 5, Cap. 10; Bibliografía 8, Caps. 4 y 7]	14	0
7	Viscoelasticidad lineal [Bibliografía 2, Cap. 9; Bibliografía 7, Cap. 5; Bibliografía 9, Caps. 1 y 2]	14	0
Total		96	0
Suma total de horas		96	
Contenido Temático			
	Tema y subtemas		
1	<p>Antecedentes matemáticos [Bibliografía 3, 4 y 5]</p> <ul style="list-style-type: none"> 1.1. Transformaciones lineales de coordenadas 1.2. Notación indicial 1.3. Transformaciones generales de coordenadas 1.4. Teorema Espectral, de Cayley-Hamilton y Descomposición Polar 1.5. Tensor Métrico Fundamental, derivadas covariantes y símbolos de Christoffel 1.6. Gradiente, divergencia, rotacional y el operador $\nabla \cdot \square$ 1.7. El tensor de Riemann y las identidades de Bianchi 1.8 Interpretación física de vectores y tensores 		
2	<p>Cinemática del medio continuo [Bibliografía 2, 6]</p> <ul style="list-style-type: none"> 2.1. Definición de un medio continuo [Bibliografía 5, páginas 1 y 2] 2.2. Mapeos y representaciones de medios continuos 2.3. Descripción de Euler y descripción de Lagrange 2.4. El tensor de deformación de un medio continuo 2.5. Dilataciones y deformaciones puras 2.6. El tensor de rapidez de deformación 2.7. Teorema de Reynolds 2.8. La ecuación de balance de masa 		
3	<p>Dinámica del medio continuo [Bibliografía 2 Cap. 3; Bibliografía 6, Cap. 1,]</p> <ul style="list-style-type: none"> 3.1. Las fuerzas de cuerpo y las fuerzas de superficie 3.2. El tensor de esfuerzos 3.3. Ejes principales y círculo de Mohr 3.4. Las ecuaciones de balance de momento lineal 3.5. Simetría del tensor de esfuerzos. 3.6. Ecuación de balance de momento angular 		
4	<p>Ecuaciones constitutivas [Bibliografía 7, Caps. 4 y 5; Bibliografía 10 Cap. 6]</p> <ul style="list-style-type: none"> 4.1. Desigualdad de Clasius-Duhem. Axiomas constitutivos 4.2. Sólido elástico 4.3. Sólido elasto-plástico 4.4. Fluidos ideales 4.5. Fluidos newtonianos 		

	4.6. Fluidos no newtonianos y sólidos no hookeanos 4.7. Otros materiales: Materiales ortotrópicos y triclónicos
5	Elasticidad lineal [Bibliografía 2, Cap. 6; Bibliografía 5, Cap. 9;] 5.1. Ley de Hooke 5.2. Elasticidad lineal 5.3. Elasticidad plana 5.4. Torsión
6	Análisis lineal de mecánica de fluidos [Bibliografía 2, Cap.7; Bibliografía 5, Cap. 10; Bibliografía 8, Caps. 4 y 7] 6.1. Tensor de esfuerzos viscosos 6.2. Ecuación de Navier-Stokes 6.3. Soluciones exactas y aproximadas de la ecuación de Navier-Stokes
7	Viscoelasticidad lineal [Bibliografía 2, Cap. 9; Bibliografía 7, Cap. 5; Bibliografía 9, Caps. 1 y 2] 7.1. Ecuaciones constitutivas y sus propiedades 7.2. Modelos simples
Estrategias didácticas	
Exposición	
Trabajo en equipo	
Lecturas	X
Trabajo de investigación	
Prácticas (taller o laboratorio)	
Prácticas de campo	
Aprendizaje por proyectos	
Aprendizaje basado en problemas	
Casos de enseñanza	
Otras (especificar)	
Evaluación del aprendizaje	
Exámenes parciales	X
Examen final	X
Trabajos y tareas	X
Presentación de tema	
Participación en clase	X
Asistencia	
Rúbricas	
Portafolios	
Listas de cotejo	
Otras (especificar)	
Línea de investigación: Ciencia e Ingeniería de Materiales	
Perfil profesiográfico	
Grado	Maestro en Ciencia e Ingeniería de Materiales
Experiencia docente	Conocimiento en el área de Ciencia e Ingeniería de Materiales
Otra característica	
Bibliografía básica:	
1. Atanackovic T. M., Guran A, <i>Theory of Elasticity for Scientists and Engineers</i> , Birkhäuser, Boston, 2000.	
2. Bird, Armstrong, Hassager, <i>Dynamics of Polymeric Fluids I: Fluid Mechanics</i> , Chandrasekharaiah D.S. and Debnath L., <i>Continuum Mechanics</i> , Academic Press, Boston, 1994.	
3. Christensen M., <i>Theory of Viscoelasticity</i> , Academic Press, 1971	
4. Chung T. J., <i>Applied Continuum Mechanics</i> , Cambridge UK, 1996.	
5. Mase G.E. and Mase G.T., <i>Continuum Mechanics for Engineers</i> , CRC Press, Boca Raton, 1992.	

6. Narasimhan M., *Principles of Continuum Mechanics*, John Wiley & Sons, Inc., N. Y., 1993.
7. Simmonds J. G., *A Brief Tensor Analysis*, 2nd edition, Springer-Verlag, 1994.
8. Sokolnikoff J. S., *Análisis Tensorial*, Ed. Limusa, 1982.

Bibliografía complementaria:

1. Eringen C.A., *Mechanics of Continua*, Krieger Publishing, Malabar, 1980.
2. Eringen A.C. and Maugin G.A., *Electrodynamics of Continua I: Foundations and Solid Mechanics*, Springer-Verlag, N.Y., 1990.
3. Fung Y.C. , *A First Course in Continuum Mechanics*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1969.
4. Gurtin M.E., *An Introduction to Continuum Mechanics*, Academic Press, 1981.
5. Hunter S.C., *Mechanics of Continuous Media*, John Wiley & Sons, N.Y., 1983.
6. Spencer A.J.M., *Continuum Mechanics*, John Wiley & Sons, N.Y., 1980.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIA

E INGENIERÍA DE MATERIALES



MAESTRÍA EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

Programa de la actividad académica **Propiedades Mecánicas de Materiales**

Clave	Semestre 1 o 2	Créditos 12	Básica			
Modalidad	Curso(X) Taller () Lab () Sem ()	Tipo	T (X)	P ()	T/P ()	
Carácter	Obligatorio ()	Optativo ()	Horas			
	Obligatorio E (X)	Optativo E ()				
Duración del programa		Semestral	Semana		Semestre	
			Teóricas 6		Teóricas 96	
			Prácticas 0		Prácticas 0	
			Total 6		Total 96	

Seriación	
Ninguna (X)	
Obligatoria ()	
Actividad académica anterior	
Actividad académica subsecuente	
Indicativa ()	
Actividad académica anterior	
Actividad académica subsecuente	

Objetivo general:

El alumno conocerá los fundamentos de la física del comportamiento mecánico de los materiales, así como los mecanismos de las fallas mecánicas de los materiales y las características mecánicas distintivas de cada tipo de material.

Adquirirá conocimientos sólidos sobre propiedades mecánicas y microestructura y aprenderá a relacionar el comportamiento mecánico macroscópico con la microestructura de los materiales.

El alumno deberá contar con los conocimientos de los temas de la actividad académica introductoria del Posgrado "Fundamentos de Matemáticas para Materiales" y de un curso elemental de física moderna al nivel de licenciatura.

Índice temático		
	Tema	Horas semestre

		Teóricas	Prácticas
1	Átomos, moléculas y estructuras cristalinas [Z. D. Jastrzebski; R.E. Reed-Hill]	6	0
2	Comportamiento Mecánico [Dieter G. E.; Ashby M.F.]	6	0
3	Defectos en sólidos [Dieter G.E., Cap. 5; Nabarro F.R.N., Cap. 2; Hirth J.P., Lothe J., Cap. 3]	12	0
4	Diagramas de fase [Z.D. Jastrzebski; W.D. Callister]	12	0
5	Deformación y re-cristalización [W.D. Callister; M.F. Ashby]	12	0
6	Fractura [Dieter G.E., Cap. 7; Ashby M.F. and Jones D.R.H.]	3	0
7	Tratamientos superficiales [S.H. Avner]	3	0
8	Super-plasticidad y Anelasticidad [Z.D. Jastrzebski; W.D. Callister; Padmanabhan K.A]	6	0
9	Propiedades mecánicas de Cerámicos [Ashby M.F. and Jones D.R.H.]	12	0
10	Materiales compuestos [Ashby M.F. and Jones D.R.H.]	6	0
11	Propiedades Mecánicas de Polímeros [Ashby M.F. and Jones D.R.H., y Young R.J. Ward y Hadley]	12	0
12	Mecánica del medio Continuo [F.P. Beer]	6	0
Total		96	0
Suma total de horas		96	
Contenido Temático			
Tema y subtemas			
1	Átomos, moléculas y estructuras cristalinas [Z. D. Jastrzebski; R.E. Reed-Hill] <ul style="list-style-type: none"> 1.1 El átomo de Bohr 1.2 Ecuación de Schrödinger 1.3 Enlaces atómicos 1.4 Ángulos de enlace 1.5 Enlace de Van der Waals 1.6 Redes de Bravais 1.7 Sistemas cristalinos 1.8 Índices de Miller 1.9 Métodos para determinar la estructura cristalina. 		
2	Comportamiento Mecánico [Dieter G. E.; Ashby M.F.] <ul style="list-style-type: none"> 2.1 Las pruebas de tensión y compresión 2.2 La prueba de dureza 2.3 La prueba de Impacto 2.4 La prueba de fatiga 2.5 La prueba de termo-fluencia. 2.6 Bases atómicas del comportamiento elástico 		

3	<p>Defectos en sólidos [Dieter G.E., Cap. 5; Nabarro F.R.N., Cap. 2; Hirth J.P., Lothe J., Cap. 3]</p> <ul style="list-style-type: none"> 3.1 Introducción 3.2 Teoría elástica de las dislocaciones; Caso general, dislocación de tornillo y de borde 3.3 Teoría elástica de defectos puntuales 3.4 Interacción entre dislocaciones rectilíneas 3.5 Interacción entre dislocación y esfuerzo aplicado 3.6 Interacción entre dislocación y defectos puntual 3.7 Tensión de línea 3.8 Fuerzas imágenes 3.9 Dislocaciones parciales
4	<p>Diagramas de fase [Z.D. Jastrzebski; W.D. Callister]</p> <ul style="list-style-type: none"> 4.1 Nucleación homogénea 4.2 Nucleación heterogénea. 4.1 Diagramas de una sola componente, alotropía. 4.2 Diagramas binarios. 4.3 Reglas de Hume Rothery 4.3 Regla de la palanca 4.4 Regla de las fases de Gibbs. 4.3 Diagramas ternarios
5	<p>Deformación y re-cristalización [W.D. Callister; M.F. Ashby]</p> <ul style="list-style-type: none"> 5.1 Planos y direcciones de deslizamiento 5.2 Ley de Schmid 5.3 El papel de las fronteras de grano en la deformación plástica. 5.4 Endurecimiento por deformación en frío. 5.5 Recuperación por re-cristalización. 5.6 Endurecimiento por aleación. 5.7 Endurecimiento por precipitación 5.8 Endurecimiento por difusión 5.9 Transformación Martensítica. 5.10 Transformación Martensítica en aceros. 5.11 Templabilidad de los aceros 5.12 Hierros de fundición.

6	<p>Fractura [Dieter G.E., Cap. 7; Ashby M.F. and Jones D.R.H.]</p> <ul style="list-style-type: none"> 6.1 Esfuerzo teórico para producir fractura 6.2 Teoría de Griffith 6.3 Tipos de fractura. 6.4 Teorías sobre la iniciación de grietas. 6.5 Transición frágil-ductil. 6.6 Fractura por fatiga. 6.7 Aplicaciones. Consideración de la falla por fractura en el diseño de equipo
7	<p>Tratamientos superficiales [S.H. Avner]</p> <ul style="list-style-type: none"> 7.1 Mecanismos de difusión. 7.2 Leyes de Fick y sus aplicaciones. 7.3 Cementación 7.4 Nitruración 7.5 Carbo-nitruración 7.6 Granallado y apisonado superficial 7.7 Acabados superficiales.
8	<p>Super-plasticidad y Anelasticidad [Z.D. Jastrzebski; W.D. Callister; Padmanabhan K.A]</p> <ul style="list-style-type: none"> 8.1 Dependencia del esfuerzo y la deformación con la rapidez de deformación. 8.2 Dependencia de la rapidez de deformación con el tamaño de grano. 8.3 Mecanismos propuestos para explicar la super-plasticidad. 8.4 Métodos para obtener materiales con propiedades super-plásticas. 8.5 Aplicaciones. 8.6 Comportamiento visco-elástico de materiales 8.7 Efecto termo-elástico 8.8 Capacidad de amortiguamiento (Fricción interna) 8.9 Modulo elástico complejo 8.10 Aplicaciones.
9	<p>Propiedades mecánicas de Cerámicos [Ashby M.F. and Jones D.R.H.]</p> <ul style="list-style-type: none"> 9.1 Fractura frágil de los cerámicos 9.2 Comportamiento elástico 9.3 Cerámicas cristalinas y no cristalinas 9.4 Influencia de la porosidad 9.5 Dureza 9.6 Termofluencia 9.7 Vidrios, transición vítrea
10	<p>Materiales compuestos [Ashby M.F. and Jones D.R.H.]</p> <ul style="list-style-type: none"> 10.1 Tipos de materiales compuestos 10.2 Compuestos reforzados con partículas 10.3 Compuestos reforzados con fibras 10.4 Requerimientos para la matriz 10.5 Refuerzos

11	Propiedades Mecánicas de Polímeros [Ashby M.F. and Jones D.R.H., y Young R.J. Ward y Hadley] 11.1. Tipos de polímeros 11.2 Comportamiento mecánico 11.3 Mecanismos de deformación de polímeros semicristalinos 11.4 Polímeros termoplásticos y termofijos 11.5 Viscoelasticidad.- Módulo de relajación 11.6 Termofluencia viscoelástica 11.7 Elastómeros 11.8 Resistencia al impacto, fatiga, resistencia al desgarre 11.9 Aditivos 11.10 Aplicaciones		
12	Mecánica del medio Continuo [F.P. Beer] 12.1 Ley de Hooke generalizada 12.2 Ley de Hooke para materiales isótropos 12.3 Relaciones entre módulo elástico normal, módulo de corte y módulo de compresibilidad para sólidos isótropos. 12.4 Circulo de Mohr para dos y tres dimensiones. 12.5 Criterio de la energía de distorsión de Von Mises y de Tresca.		
Estrategias didácticas		Evaluación del aprendizaje	
Exposición		Exámenes parciales	X
Trabajo en equipo		Examen final	X
Lecturas	X	Trabajos y tareas	X
Trabajo de investigación		Presentación de tema	
Prácticas (taller o laboratorio)		Participación en clase	X
Prácticas de campo		Asistencia	
Aprendizaje por proyectos		Rúbricas	
Aprendizaje basado en problemas		Portafolios	
Casos de enseñanza		Listas de cotejo	
Otras (especificar)		Otras (especificar)	
Línea de investigación: Ciencia e Ingeniería de Materiales			
Perfil profesiográfico			
Grado	Maestro en Ciencia e Ingeniería de Materiales		
Experiencia docente	Conocimiento en el área de Ciencia e Ingeniería de Materiales		
Otra característica			
Bibliografía básica:			
1. Ashby M.F. and Jones D.R.H., <i>Engineering Materials 1 & 2</i> , Pergamon Press, Oxford, 1980.			
2. Dieter G.E., <i>Mechanical Metallurgy</i> , 4rd Edition, McGraw-Hill, 1995.			
3. Ferdinand P. Beer and E. Russell., <i>Mechanics of Materials</i> . McGraw Hill, 1996			

4. Hirth J.P., Lothe J., *Theory of Dislocations*, McGraw-Hill Book, N.Y., 1968.
5. Nabarro F.R.N., *Theory of Crystal Dislocation*, Clarendon Press, Oxford, 1967.
6. Young R.J., *Introduction to Polymers*, 2nd. Edition, Chapman and Hall, London, 1991.
7. Ward, I. M., Hadley D.W., *Mechanical Properties of Solid Polimers*, Macmillan,

Bibliografía complementaria:

1. Felbeck D.K. and Atkins A.G., *Strength and Fracture of Engineering Solids*, 2nd. Edition, Prentice Hall Engineering, *Science & Math.*, 1996.
2. Reed-Hill R.E. and Abbaschian R., *Physical Metallurgy Principles*, 3rd. Edition, PWS Publishing Company, Boston, 1994.
3. R.W. Cahn and P. Haasen., *Physical Metallurgy*. North-Hillaand Physiscs Publishing.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIA
E INGENIERÍA DE MATERIALES



MAESTRÍA EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

Programa de la actividad académica **Termodinámica de los Materiales**

Clave	Semestre 1 o 2	Créditos 12	Básica			
Modalidad	Curso(X) Taller () Lab () Sem ()	Tipo	T (X)	P ()	T/P ()	
Carácter	Obligatorio () Optativo ()	Horas				
	Obligatorio E (X) Optativo E ()					
Duración del programa	Semestral	Semana		Semestre		
		Teóricas 6		Teóricas 96		
		Prácticas 0		Prácticas 0		
		Total 6		Total 96		
Seriación						
Ninguna (X)						
Obligatoria ()						
Actividad académica anterior						
Actividad académica subsecuente						
Indicativa ()						
Actividad académica anterior						
Actividad académica subsecuente						

Objetivo general:
El alumno obtendrá las herramientas de la termodinámica para solucionar los problemas que se presentan en las aplicaciones modernas de la ciencia de los materiales, utilizando el método propuesto por Herbert B. Callen (Callen 1960, 1985). Este método introduce la termodinámica declarando cuatro postulados concisos que facilitan la comprensión del formalismo general de la misma en poco tiempo.

Los temas marcados con asterisco se consideran opcionales, son relevantes y/o complementarios.

Índice temático			
	Tema	Horas semestre	
		Teóricas	Prácticas
1	Conceptos básicos y postulados (Callen 1960, cap.1; Sychev 1973, Caps.1, 3,4 y 6)	12	0

2	Estructura formal de la termodinámica (Callen 1985, Caps. 1-4; Sychev 1973, Caps. 3 y 4)	14	0
3	Aplicaciones a sistemas eléctricos y magnéticos (Sychev 1973, Caps. 3 y 4; Callen 1960, cap. 14; Enss y Hunklinger 2005, Cap. 11; Tishin y Spichkin 2003, Cap. 2; Ibach y Lüth 2009, cap. 8)	12	0
4	Estabilidad y transiciones de fase en sistemas monocomponente (Callen 1985, Caps. 4-8; DeHoff 2006, Caps. 5 y 7; Tester y Modell 1996, Caps. 6 y 7; Sychev 1983, Cap. 7)	12	0
5	Termodinámica de las soluciones (Callen 1985, Cap. 13; DeHoff 2006, Caps. 6, 7 y 8; Lupis 1983, Caps. IV y VI)	12	0
6	Diagramas de fases de sistemas multicomponentes (DeHoff 2006, Caps. 9 y 10; Lupis 1983, Cap. VII)	10	0
7	Equilibrios de las reacciones químicas (Callen 1985, Caps. 8 y 13; Keszei 2012, Cap. 8; DeHoff 2006, Cap. 11; Lupis 1983, Cap. V).	10	0
8	Fenómenos de superficie (DeHoff 2006, Caps. 12 y 13; Lupis 1983, Cap. XIII; Tester y Modell 1996, Caps. 15-17)	7	0
9	Defectos en cristales (DeHoff 2006, Cap. 13; Lupis 1983, Cap. XIII; Tester y Modell 1996, Cap. 19)	7	0
Total		96	0
Suma total de horas		96	
Contenido Temático			
Tema y subtemas			
1	<p>Conceptos básicos y postulados (Callen 1960, cap.1; Sychev 1973, Caps.1, 3,4 y 6)</p> <p>1.1. Los sistemas termodinámicos y sus restricciones.</p> <p>1.2. Trabajo en termodinámica.</p> <p>1.2.1. Trabajo de expansión.</p> <p>1.2.2. Trabajo sobre una superficie.</p> <p>1.2.3. Coordinada generalizada y fuerza conjugada en interacciones eléctricas.</p> <p>1.2.4. Coordinada generalizada y fuerza conjugada en interacciones magnéticas.</p> <p>1.2.5. Generalización del concepto de trabajo en termodinámica.</p> <p>1.3. Definición operacional de energía interna y calor.</p> <p>1.4. Equilibrio termodinámico y primer postulado.</p> <p>1.5. El problema fundamental de la termodinámica.</p> <p>1.6. Los postulados de máxima entropía.</p>		

2	<p>Estructura formal de la termodinámica (Callen 1985, Caps. 1-4; Sychev 1973, Caps. 3 y 4)</p> <ol style="list-style-type: none"> 2.1. La ecuación de Euler. 2.2. Parámetros intensivos y ecuaciones de estado. 2.3. Ecuación de Gibbs-Duhem. 2.4. Formulaciones alternativas. <ol style="list-style-type: none"> 2.4.1. Potenciales termodinámicos. 2.4.2. Funciones de Massieu* 2.5. Definición de algunas segundas derivadas. 2.6. Relaciones de Maxwell. 2.7. Reducción de derivadas. 2.8. Consecuencias de los postulados 3 y 4 en el comportamiento de las segundas derivadas alrededor del cero absoluto.
3	<p>Aplicaciones a sistemas eléctricos y magnéticos (Sychev 1973, Caps. 3 y 4; Callen 1960, cap. 14; Enss y Hunklinger 2005, Cap. 11; Tishin y Spichkin 2003, Cap. 2; Ibach y Lüth 2009, cap. 8)</p> <ol style="list-style-type: none"> 3.1. Descripción general de los materiales eléctricos y magnéticos. 3.2. Energías libres de sistemas eléctricos y magnéticos y relaciones de Maxwell. 3.3. Calores específicos. 3.4. Susceptibilidad Magnética. Materiales diamagnéticos, paramagnéticos, ferromagnéticos. 3.5. Curvas de magnetización. 3.6. Ecuaciones de estado magnéticas. 3.7. Efecto magnetocalórico. 3.8. Ciclos de trabajo en sistemas eléctricos y magnéticos. 3.9. Ciclos de enfriamiento y refrigeración criogénica. 3.10. El diamagnetismo perfecto y el estado superconductor. 3.11. La inaccesibilidad del cero absoluto*
4	<p>Estabilidad y transiciones de fase en sistemas monocomponente (Callen 1985, Caps. 4-8; DeHoff 2006, Caps. 5 y 7; Tester y Modell 1996, Caps. 6 y 7; Sychev 1983, Cap. 7)</p> <ol style="list-style-type: none"> 4.1. Condiciones de estabilidad. <ol style="list-style-type: none"> 4.1.1. Algunas consecuencias de los criterios de estabilidad. 4.2. Transiciones de primer y segundo orden. <ol style="list-style-type: none"> 4.2.1. Diagramas de fases de sustancias puras. Ecuación de van der Walls. 4.3. Ecuación de Clapeyron y sus análogas. 4.4. Regla de fases de Gibbs. 4.5. Nucleación y crecimiento en transiciones de fase* 4.6. Puntos triples.

	<p>4.7. Diagramas de sistemas unitarios heterogéneos.</p> <p>4.8. Superconductores de tipo I 4.8.1. La transición superconductor en ausencia de campo magnético. 4.8.2. La transición superconductor en presencia de un campo magnético.</p> <p>4.9. Superconductores de tipo II.</p> <p>4.10. Transiciones de orden. 4.10.1. Ordenamiento ferromagnético. 4.10.2. Ordenamiento ferrimagnético. Temperatura de Curie y la susceptibilidad de los ferrimagnetos. 4.10.3. Ordenamiento antiferromagnético. Susceptibilidad por debajo de la Temperatura de Neél.</p>
5	<p>Termodinámica de las soluciones (Callen 1985, Cap. 13; DeHoff 2006, Caps. 6, 7 y 8; Lupis 1983, Caps. IV y VI)</p> <p>5.1. Ley de estados correspondientes* 5.2. Métodos de expansión de Virial* 5.3. Potenciales químicos de sistema monocomponentes* 5.4. Mezclas de gases ideales. 5.5. Potenciales químicos de mezclas de gases reales. 5.6. Soluciones ideales de gases reales.</p> <p>5.7. Soluciones sólidas y líquidas. 5.7.1. Soluciones ideales en general.</p> <p>5.8. Soluciones reales. 5.8.1. Magnitudes termodinámicas en exceso.</p> <p>5.9. Leyes de Henry y de Raoult. 5.10. Aplicación de la ecuación de Gibbs-Duhem 5.11. Soluciones regulares.</p>
6	<p>Diagramas de fases de sistemas multicomponentes (DeHoff 2006, Caps. 9 y 10; Lupis 1983, Cap. VII)</p> <p>6.1. Puntos eutécticos, peritéticos. 6.2. Descomposiciones espinodales y eutectoides. 6.3. Diagramas de sistemas ternarios y cuaternarios* 6.4. Puntos peritectoides, cuasiperitéticos* 6.5. Diagramas de fases de compuestos: cerámicos. 6.6. Transiciones martensíticas, de orden-desorden, vítreas. 6.7. Superconductores cerámicos*</p>

7	Equilibrios de las reacciones químicas (Callen 1985, Caps. 8 y 13; Keszei 2012, Cap. 8; DeHoff 2006, Cap. 11; Lupis 1983, Cap. V) 7.1. Componentes independientes y regla de las fases de Gibbs. 7.2. Coordenada generalizada y fuerza conjugada en reacciones químicas. 7.3. Condición de equilibrio químico a presión y temperatura constantes. 7.4. Equilibrios de reacción heterogénea de componentes inmiscibles. 7.5. Cambio de entropía en una reacción química como consecuencia de los postulados 3 y 4. 7.6. Cálculo de la constante de equilibrio a partir de datos termodinámicos. 7.7. Calor de reacción o formación. 7.8. El principio de Le Châtelier-Braun generalizado. 7.9. Diagramas Ellingham y de predominio de especies de Pourbaix		
8	Fenómenos de superficie (DeHoff 2006, Caps. 12 y 13; Lupis 1983, Cap. XIII; Tester y Modell 1996, Caps. 15-17) 8.1. Efectos de curvatura sobre equilibrio de fases 8.2. Las formas de equilibrio de cristales 8.3. Gráficas de Wulff y ecuación de Laplace. 8.4. Adsorción e isoterma de Langmuir		
9	Defectos en cristales (DeHoff 2006, Cap. 13; Lupis 1983, Cap. XIII; Tester y Modell 1996, Cap. 19) 9.1. Defectos puntuales, intersticiales, divacancias 9.2. Defectos tipo Frenkel, Schottky y combinados 9.3. Cristales no-estequiométricos* 9.4. Materiales amorfos, vidrios, con impurezas*		
Estrategias didácticas		Evaluación del aprendizaje	
Exposición		Exámenes parciales	X
Trabajo en equipo		Examen final	X
Lecturas	X	Trabajos y tareas	X
Trabajo de investigación		Presentación de tema	
Prácticas (taller o laboratorio)		Participación en clase	X
Prácticas de campo		Asistencia	
Aprendizaje por proyectos		Rúbricas	
Aprendizaje basado en problemas		Portafolios	
Casos de enseñanza		Listas de cotejo	
Otras (especificar)		Otras (especificar)	
Línea de investigación: Ciencia e Ingeniería de Materiales			

Perfil profesiográfico	
Grado	Maestro en Ciencia e Ingeniería de Materiales
Experiencia docente	Conocimiento en el área de Ciencia e Ingeniería de Materiales
Otra característica	
Bibliografía básica:	
<ol style="list-style-type: none"> Callen, Herbert B. (1960). <i>Thermodynamics: An Introduction to the Physical Theories of Equilibrium Thermostatistics and Irreversible Thermodynamics</i>. New York: J. Wiley. (1985). <i>Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics</i>. John Wiley & Sons. DeHoff, Robert (2006). <i>Thermodynamics in Materials Science</i>. Taylor & Francis. Enss, Christian y Siegfried Hunklinger (2005). <i>Low-Temperature Physics</i>. Springer-Verlag Berlin, Heidelberg. Ibach, Harald y Hans Lüth (2009). <i>Solid-state physics : an introduction to principles of materials science</i>. 4th Edition. Physics and astronomy online library. Springer. Keszei, Ernő (2012). <i>Chemical Thermodynamics: An Introduction</i>. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. Lupis, C. H. P. (1983). <i>Chemical thermodynamics of materials</i>. North-Holland. Sychev, Viacheslav Vladimirovich (1973). <i>Complex Thermodynamic Systems</i>. 1th Edition. Studies in Soviet Science. Springer US. (1983). <i>The Differential Equations of Thermodynamics</i>. Moscow: MIR. Tester, Jefferson W. y Michael Modell (1996). <i>Thermodynamics and Its Applications</i>. 3rd edition. Prentice Hall International Series in the Physical chemical engineering Science. Prentice Hall PTR. Tishin, A. M. e Y. I. Spichkin (2003). <i>The Magnetocaloric Effect and its Applications</i>. Series in Condensed Matter Physics. CRC Press. 	
Bibliografía complementaria:	
<ol style="list-style-type: none"> Aleksishivili, M. y S. Sidamonidze (2002). <i>Problems in Chemical Thermodynamics with Solutions</i>. Singapore: World Sci. Press. Bard, A. J. y M. Stratmann (2002). <i>Encyclopedia of Electrochemistry</i>. En: ed. por E. Gilaedi y M. Urbakh. Vol. 1. Weinheim, Germany: Wiley-VCH. Cap. Thermodynamics of electrified interfaces. Carmona, Gerardo (2000). <i>Fenómenos Críticos y el Grupo de Renormalización</i>. Facultad de Ciencias, UNAM. David, Chandler (1987). <i>Introduction to Modern Statistical Mechanics</i>. UK: Oxford University Press. Devereux, O. F. (1993). <i>Topics in Metallurgical Thermodynamics</i>. New York: J. Wiley. Doremus, R. H. (1985). <i>Rates of Phase Transformations</i>. San Diego, CA, USA: Academic Press. Gareth, Price (1998). <i>Thermodynamics of Chemical Processes</i>. Oxford: Oxford University Press. Glazov, V. M. y L. M. Pavlova (1989). <i>Semiconductor & Metal Binary Systems: Phase Equilibria and Chemical Thermodynamics</i>. New York: Consultant Bureau. Hudson, J. (1996a). <i>Thermodynamics of Materials</i>. Vol. 1. John Wiley & Sons. (1996b). <i>Thermodynamics of Materials</i>. Vol. 2. John Wiley & Sons. Kittel, Charles (2005). <i>Introduction to Solid State Physics</i>. 8th Edition. Wiley. Klotz, I. M. y R. M. Rosenberg (1994). <i>Chemical Thermodynamics. Basic Theory and Methods</i>. 5th Edition. New York: John Wiley & Sons. 	

12. Plischke, M. y B. Bergersen (1994). *Equilibrium Statistical Physics*. 2nd Edition. World Scientific.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIA
E INGENIERÍA DE MATERIALES



MAESTRÍA EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

Programa de la actividad académica **Biomateriales**

Clave -	Semestre 1 o 2	Créditos 12	Básica			
Modalidad	Curso (X) Taller () Lab () Sem ()			Tipo	T (X) P () T/P ()	
Carácter	Obligatorio () Optativo ()		Horas			
	Obligatorio E (X) Optativo E ()					
Duración del programa		Semestral	Semana		Semestre	
			Teóricas 6		Teóricas 96	
			Prácticas 0		Prácticas 0	
			Total 6		Total 96	

Seriación	
Ninguna (X)	
Obligatoria ()	
Actividad académica anterior	
Actividad académica subsecuente	
Indicativa ()	
Actividad académica anterior	
Actividad académica subsecuente	

Objetivo general:

El alumno:

- 1) Obtendrá los conocimientos básicos para entender el comportamiento y desempeño de los diferentes materiales en un entorno biológico.
- 2) Reconocerá con precisión las características y propiedades de los diferentes materiales (metálicos, cerámicos, poliméricos e híbridos) para su eventual aplicación en medicina.
- 3) Conocerá las interacciones de los diferentes materiales con entidades biológicas (células, proteínas, sangre, hueso, etc.).

- 4) Conocerá los ensayos utilizados para evaluar el desempeño de un material en un entorno biológico (ensayos in vitro e in vivo), así como los mecanismos de degradación del mismo.
- 5) Conocerá las principales aplicaciones de los biomateriales.

Índice temático			
	Tema	Horas semestre	
		Teóricas	Prácticas
1	Materiales para aplicaciones biomédicas	24	0
2	Conceptos básicos en el uso de biomateriales en dispositivos médicos	18	0
3	Pruebas biológicas de biomateriales	12	0
4	Respuesta biológica a los biomateriales	18	0
5	Degradación de biomateriales en ambientes biológicos	12	0
6	Aplicaciones de biomateriales	12	0
Total		96	0
Suma total de horas			

Contenido Temático	
	Tema y subtemas
1	<p>Materiales para aplicaciones biomédicas</p> <p>1.1 Clases y propiedades de materiales usados en Medicina: Metálicos, Cerámicos, Poliméricos (naturales y sintéticos) y Compuestos/Híbridos</p> <p>1.2 Definiciones importantes. Material biomédico, biomaterial y material biológicos, biocompatibilidad</p>
2	<p>Conceptos básicos en el uso de biomateriales en dispositivos médicos</p> <p>2.1 Propiedades superficiales de biomateriales (adsorción de proteínas y células)</p> <p>2.2 Interacción de proteínas con biomateriales</p> <p>2.3 Interacción de células con biomateriales</p> <p>2.4 Interacción de sangre con biomateriales</p> <p>2.5 Células madre: conceptos básicos</p>
3	<p>Pruebas biológicas de biomateriales</p> <p>3.1 Evaluación de biocompatibilidad</p> <p>3.2 Ensayos in vitro</p> <p>3.3 Ensayos in vivo</p>
4	<p>Respuesta biológica a los biomateriales</p> <p>4.1 Inflamación, reparación y respuesta a cuerpos extraños</p> <p>4.2 Toxicidad e hipersensibilidad</p>

	4.3 Corrosión. Minimización de toxicidad de implantes metálicos 4.4 Infección, tumorigénesis y calcificación de biomateriales		
5	Degradación de biomateriales en ambientes biológicos 5.1 Degradación de metales y cerámicos 5.2 Degradación de polímeros 5.3 Materiales biodegradables. Definiciones, mecanismos de degradación y factores que influyen en la rapidez de degradación 5.4 Técnicas: Ensayos de grado de degradación		
6	Aplicaciones de biomateriales 6.1 Dispositivos médicos cardiovasculares 6.2 Células artificiales 6.3 Aplicaciones ortopédicas 6.4 Implantes dentales 6.5 Adhesivos 6.6 Aplicaciones oftalmológicas 6.7 Prótesis 6.8 Biosensores médicos 6.9 Sustitutos de piel 6.10 Suturas 6.11 Sistemas de liberación de fármacos 6.12 Diagnóstico 6.13 Aplicaciones médicas del silicón		
Estrategias didácticas		Evaluación del aprendizaje	
Exposición	X	Exámenes parciales	X
Trabajo en equipo	X	Examen final	X
Lecturas	X	Trabajos y tareas	X
Trabajo de investigación		Presentación de tema	X
Prácticas (taller o laboratorio)		Participación en clase	X
Prácticas de campo		Asistencia	
Aprendizaje por proyectos		Rúbricas	
Aprendizaje basado en problemas		Portafolios	
Casos de enseñanza		Listas de cotejo	
Otras (especificar)		Otras (especificar)	
Línea de investigación: Biomateriales			
Perfil profesiográfico			
Grado	Maestro en Ciencia e Ingeniería de Materiales		
Experiencia docente	Conocimiento en el área de Ciencia e Ingeniería de Materiales		

Otra característica	-
Bibliografía básica:	
<ol style="list-style-type: none"> 1. B. D. Ratner et al. Biomaterials Science. An Introduction to Materials in Medicine. 2013. 2. J.S. Temenoff & A.G. Mikos. Biomaterials. The intersection of Biology and Materials Science. 2008. 3. Q. Chen & G. Thouas. Biomaterials. A basic Introduction. 2015. 	
Bibliografía complementaria:	
<ol style="list-style-type: none"> 1. Biomaterials. Principles and applications. Edited by Joon B. Park and Joseph D. Bronzino. 2. Biomaterials Degradation. Edited by M.A. Barbosa; 3) Polymeric Biomaterials. Edited by Severian Dumitriu. 	



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIA
E INGENIERÍA DE MATERIALES



MAESTRÍA EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

Programa de la actividad académica **Matemáticas Aplicadas a Materiales**

Clave	Semestre 1 o 2	Créditos 12	Básica			
Modalidad	Curso(X) Taller () Lab () Sem ()	Tipo	T (X)	P ()	T/P ()	
Carácter	Obligatorio ()	Optativo ()	Horas			
	Obligatorio E (X)	Optativo E ()				
Duración del programa		Semestral	Semana		Semestre	
			Teóricas 6		Teóricas 96	
			Prácticas 0		Prácticas 0	
			Total 6		Total 96	

Seriación	
Ninguna (X)	
Obligatoria ()	
Actividad académica anterior	
Actividad académica subsecuente	
Indicativa ()	
Actividad académica anterior	
Actividad académica subsecuente	

Objetivo general:

El alumno conocerá métodos analíticos para la formulación y solución de ecuaciones diferenciales. Las ecuaciones diferenciales, tanto ordinarias como parciales, se utilizan para modelar el comportamiento de la gran mayoría de los materiales. Los métodos y técnicas comprenden expansiones en series de eigenfunciones, transformadas y métodos aproximados. Además de las técnicas analíticas, se hará uso de paquetes de software simbólico, para encontrar soluciones numéricas.

Índice temático			
	Tema	Horas semestre	
		Teóricas	Prácticas
1	Ecuaciones diferenciales	24	0
2	Ecuaciones diferenciales parciales	24	0

3	Transformaciones y funciones de green	24	0
4	Ecuaciones diferenciales no-lineales	24	0
Total		96	0
Suma total de horas		96	
Contenido Temático			
	Tema y subtemas		
1	<p>Ecuaciones diferenciales</p> <p>1.1. Motivación</p> <p>1.1.1. Importancia de las ecuaciones diferenciales para el modelado de materiales</p> <p>1.2. Ecuaciones Diferenciales Ordinarias</p> <p>1.2.1. Repaso de algunos métodos de solución para ecuaciones de primer y segundo orden</p> <p>1.2.2. Sistemas homogéneos y no-homogéneos</p> <p>1.2.3. Elementos de estabilidad, Espacio fase y puntos críticos de sistemas lineales</p> <p>1.2.4. Soluciones aproximadas y numéricas</p> <p>1.3. Ecuaciones Diferenciales Parciales</p> <p>1.3.1. Algunas ecuaciones en la ciencia de materiales</p> <p>1.3.2. Sistemas de una, dos y tres dimensiones</p> <p>1.3.3. Clasificación de las ecuaciones, formas canónicas</p> <p>1.3.4. Ecuaciones elípticas, parabólicas e hiperbólicas</p> <p>1.3.5. Introducción a algunos métodos de solución</p> <p>1.4. Problemas de valores de frontera</p> <p>1.4.1. Sistemas de ecuaciones de Sturm-Liouville</p> <p>1.4.2. Condiciones de frontera de Dirichlet y Neumann</p>		
2	<p>Ecuaciones diferenciales parciales</p> <p>2.1 Ortogonalidad de funciones</p> <p>2.2 Expansión en eigen-funciones</p> <p>2.3 Separación de variables</p> <p>2.4 Sistemas coordenados: cartesiano, cilíndrico, esférico</p> <p>2.5 Funciones especiales: Bessel, armónicos esféricos, polinomiales y otras</p> <p>2.6 Métodos numéricos</p> <p>2.7 Aplicaciones en la ciencia de materiales</p>		
3	<p>Transformaciones y funciones de green</p> <p>3.1 Solución de ecuaciones diferenciales con la transformada de Laplace</p> <p>3.2 Solución de ecuaciones diferenciales con la transformada de Fourier</p> <p>3.3 Funciones de Green</p> <p>3.4 Aplicaciones en la ciencia de materiales</p>		
4	<p>ECUACIONES DIFERENCIALES NO-LINEALES</p> <p>4.1 Sistemas dinámicos</p> <p>4.2 Mapas de Poincaré o bifurcaciones en sistemas dinámicos</p> <p>4.3 Caos</p> <p>4.4 Aplicaciones en la ciencia de materiales</p>		

Estrategias didácticas		Evaluación del aprendizaje	
Exposición		Exámenes parciales	X
Trabajo en equipo		Examen final	X
Lecturas	X	Trabajos y tareas	X
Trabajo de investigación		Presentación de tema	
Prácticas (taller o laboratorio)		Participación en clase	X
Prácticas de campo		Asistencia	
Aprendizaje por proyectos		Rúbricas	
Aprendizaje basado en problemas		Portafolios	
Casos de enseñanza		Listas de cotejo	
Otras (especificar)		Otras (especificar)	
Línea de investigación: Ciencia e Ingeniería de Materiales			
Perfil profesiográfico			
Grado	Maestro en Ciencia e Ingeniería de Materiales		
Experiencia docente	Conocimiento en el área de Ciencia e Ingeniería de Materiales		
Otra característica			
Bibliografía básica:			
<ol style="list-style-type: none"> 1. Spiegel M.R., <i>Ecuaciones Diferenciales Aplicadas</i>, Prentice-Hall, 1985. 2. Greenberg M.D., <i>Foundations of Applied Mathematics</i>, Prentice-Hall, 1978. 3. Churchill R.V., Brown J.V., <i>Fourier Series and Boundary Value Problems</i>, McgGraw-Hill, 1993. 4. Zill D.G., Cullen M.R., <i>Ecuaciones diferenciales con problemas con valores en la frontera</i>, Cengage Learning, 2009. 			
Bibliografía complementaria:			
<ol style="list-style-type: none"> 1. Kreyszig, E., <i>Advanced Engineering Mathematics</i>, Wiley 2006. 2. Strogatz S.H., <i>Nonlinear dynamics and Chaos, with applications to physics, biology, chemistry and engineering</i>, Addison-Wesley Publishing Company, 1994. 3. Arfken G. and Weber H., <i>Mathematical Methods for Physicists</i>, 5th. Ed., Harcourt/Academic Press, SD, 2001. 			



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIA
E INGENIERÍA DE MATERIALES



MAESTRÍA EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

Programa de la actividad académica **Fisicoquímica de superficies**

Clave	Semestre	Créditos	Básica			
	1 o 2	12				
Modalidad	Curso (X) Taller () Lab () Sem ()			Tipo	T (X) P () T/P ()	
Carácter	Obligatorio () Optativo ()			Horas		
	Obligatorio E (X) Optativo E ()					
Duración del programa		Semestral	Semana		Semestre	
			Teóricas 6		Teóricas 96	
			Prácticas 0		Prácticas 0	
			Total 6		Total 96	

Seriación	
Ninguna (X)	
Obligatoria ()	
Actividad académica anterior	
Actividad académica subsecuente	
Indicativa ()	
Actividad académica anterior	
Actividad académica subsecuente	

Objetivo general:

El alumno:

- 1) Conocerá a nivel microscópico sobre las propiedades físicas y químicas en sistemas discontinuos entre fases y relacionará estas propiedades con el comportamiento macroscópico de un material.
- 2) Entenderá los métodos analíticos para medir parámetros texturales como forma y tamaño de poro, densidad de grupos funcionales superficiales, entre otros.

Índice temático

Tema	Horas semestre	
	Teóricas	Prácticas

1	Modelo de una superficie	8	0
2	Descripción fenomenológica de interfaces	10	0
3	Interfaces sólido-líquido	18	0
4	Equilibrio en películas superficiales	10	0
5	Fenómeno de adsorción	10	0
6	Adsorción de gas-sólido	10	0
7	Cinética química en reacciones sólido-gas	10	0
8	Reactividad en superficies	10	0
9	Tópicos actuales	10	0
Total		96	0
Suma total de horas		96	
Contenido Temático			
	Tema y subtemas		
1	Modelo de una superficie 1.1 Energía y entropía de superficie 1.2 Modelo de superficie de Gibbs		
2	Descripción fenomenológica de interfaces 2.1 Tensión superficial. 2.2 Variación de la tensión superficial con la temperatura. 2.3 Ascenso capilar. 2.4 Ángulo de contacto y mojado. 2.5 Métodos experimentales para determinar tensión superficial, tensión interfacial y ángulo de contacto.		
3	Interfaces sólido-líquido 3.1 Sistemas coloidales. 3.2 Fenómenos de intercambio iónico, absorción, catálisis.		
4	Equilibrio en películas superficiales 4.1 Afinidades de adsorción. 4.2 Condiciones para equilibrio de adsorción. 4.3 Tipos de superficie.		
5	Fenómeno de adsorción 5.1 Ecuación de adsorción de Gibbs. 5.2 Adsorción relativa 5.3 Soluciones binarias 5.4 Actividad superficial.		
6	Adsorción de gas-sólido 6.1 Fuerzas de van der Waals, interacciones dipolo permanente-dipolo permanente, gradiente de campo-cuadrupolo, etc. 6.2 Isotermas de adsorción. 6.3 Modelo de mono y multicapa. 6.4 Parámetros de área superficial, diámetro y forma de poro. 6.5 Adsorción competitiva y coadsorción.		

7	Cinética química en reacciones sólido-gas 7.1 Adsorción disociativa. 7.2 Calor de adsorción. 7.3 Cinética química en catálisis sólido-gas 7.4 Influencia de la temperatura y catalizador.		
8	Reactividad en superficies 8.1 Teoría del estado de transición 8.2 Selectividad 8.3 Mecanismos de reacción		
9	Tópicos actuales 9.1 Nuevas técnicas 9.2 Avances recientes 9.3 Ejemplos con nuevos materiales		
Estrategias didácticas		Evaluación del aprendizaje	
Exposición		Exámenes parciales	X
Trabajo en equipo		Examen final	X
Lecturas	X	Trabajos y tareas	X
Trabajo de investigación		Presentación de tema	
Prácticas (taller o laboratorio)		Participación en clase	X
Prácticas de campo		Asistencia	
Aprendizaje por proyectos		Rúbricas	
Aprendizaje basado en problemas		Portafolios	
Casos de enseñanza		Listas de cotejo	
Otras (especificar)		Otras (especificar)	
Línea de investigación:			
Perfil profesiográfico			
Grado	Maestro en Ciencia e Ingeniería de Materiales		
Experiencia docente	Conocimiento en el área de Ciencia e Ingeniería de Materiales		
Otra característica	-		
Bibliografía básica:			
1. F. Rouquerol, J. Rouquerol, K. Sing. Adsorption by Powders & Porous solids. Academic Press. San Diego, USA, 1999.			
2. S Hartland. Surface and Interfacial Tension: Measurement, Theory, and Applications. Marcel Dekker. New York, USA, 2004.			
3. R.I. Masel. Principles of Adsorption and Reaction on Solid Surfaces. Wiley, New York, USA, 1996.			
Bibliografía complementaria:			
1. E. M. McCash. Surface Chemistry, Oxford University Press, London UK, 2002.			

2. S. Lowell, J. E. Shields, M. A. Thomas, M. Thommes, Characterization of porous solids and poders: Surface are, pore size and density, Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 2004.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIA
E INGENIERÍA DE MATERIALES



MAESTRÍA EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

Programa de la actividad académica **Simulación molecular. Teoría y aplicaciones**

Clave	Semestre 1 o 2	Créditos 12	Básica			
Modalidad	Curso(X) Taller () Lab () Sem ()	Tipo	T (X)	P ()	T/P ()	
Carácter	Obligatorio () Optativo ()	Horas				
	Obligatorio E (X) Optativo E ()					
Duración del programa	Semestral		Semana		Semestre	
			Teóricas 6		Teóricas 96	
			Prácticas 0		Prácticas 0	
			Total 6		Total 96	
Seriación						
Ninguna (X)						
Obligatoria ()						
Actividad académica anterior						
Actividad académica subsecuente						
Indicativa ()						
Actividad académica anterior						
Actividad académica subsecuente						

Objetivo general:

El alumno:

- 1) Conocerá el área de Simulación Molecular, mediante la revisión de los diferentes algoritmos establecidos para el estudio de sistemas inorgánicos, orgánicos, biológicos ó híbridos, presentes en la Ciencia e Ingeniería de Materiales.
- 2) Podrá definir conceptos básicos de algoritmos (cuánticos y clásicos) y unidades.
- 3) Revisará algoritmos clásicos (mecánica y dinámica molecular, así como MonteCarlo) y su aplicación en casos específicos, algoritmos cuánticos (DFT entre otros) y su aplicación en casos específicos y consideraciones generales para elegir el método de cálculo adecuado para un sistema de investigación particular de interés.

Índice temático			
	Tema	Horas semestre	
		Teóricas	Prácticas
1	Definición de términos	6	0
2	Mecánica Molecular	12	0
3	Dinámica Molecular	12	0
4	Métodos Monte Carlo	12	0
5	Mecánica Cuántica	12	0
6	Teoría de Funcionales de la densidad	12	0
7	Métodos Post Hartree Fock	12	0
8	Estado Sólido	12	0
9	Consideraciones prácticas	6	0
Total		96	0
Suma total de horas		96	
Contenido Temático			
	Tema y subtemas		
1	Definición de términos 1.1 Teoría, conceptos básicos (Mecánica Clásica, Mecánica Cuántica, Termodinámica) 1.2 Computación y Modelado (Modelos Cuánticos y Modelos Clásicos. Simulaciones a diferentes escalas de tiempo y tamaño) 1.3 Superficies de Energía Potencial 1.4. Sistemas atómicos y moleculares 1.5 Costo y eficiencia de un cálculo 1.6 Hardware y Software 1.7 Unidades		
2	Mecánica Molecular 2.1 Campos de Fuerza. Suposiciones fundamentales (Elongación de enlaces, Flexión angular, Torsiones, Interacciones de tipo van der Waals, Interacciones electrostáticas, Términos cruzados y términos adicionales de tipo no-enlazante, Estrategias de parametrización) 2.2 Energías de campos de fuerza y termodinámica 2.3 Optimización de geometría (Algoritmos de optimización) 2.4 Estudio de caso		

3	<p>Dinámica Molecular</p> <ul style="list-style-type: none"> 3.1 Ecuaciones de movimiento para sistemas atómicos 3.2 Métodos de diferencia finita (Algoritmo de Verlet, salto de rana) 3.3 Dinámica Molecular de cuerpos rígidos no-esféricos (Moléculas no lineales y lineales) 3.4 Conceptos generales (condiciones periódicas de frontera, alcances de potencial, radio de corte) 3.5 Estudio de caso
4	<p>Métodos Monte Carlo</p> <ul style="list-style-type: none"> 4.1 Elementos de Mecánica Estadística 4.2 Ensamblajes estadísticos comunes 4.3 Promedios termodinámicos simples 4.4 Método Metrópolis 4.5 Monte Carlo Canónico 4.6 Monte Carlo isotérmico-isobárico 4.7 Monte Carlo Gran canónico 4.8 Estudio de caso
5	<p>Mecánica Cuántica</p> <ul style="list-style-type: none"> 5.1 Principio variacional y aproximación de Born-Oppenheimer 5.2 Átomos y moléculas poli-electrónicas 5.3 Orbitales Moleculares 5.4 Ecuaciones de Hartree-Fock 5.5 Determinantes de Slater 5.6 Métodos semiempíricos 5.7 Teoría de Huckel 5.8 Estudio de caso
6	<p>Teoría de Funcionales de la densidad</p> <ul style="list-style-type: none"> 6.1 Escalera de Jacob y diferentes tipos de funcionales 6.2 Ecuaciones de Hohenberg-Kohn 6.3 Ecuaciones de Kohn-Sham y matriz de la densidad 6.4 DFT y fuerzas de dispersión, problemas y remedios 6.5 Estudio de caso
7	<p>Métodos Post Hartree Fock</p> <ul style="list-style-type: none"> 7.1 Correlación Electrónica 7.2 Teoría de Perturbaciones 7.3 Método de Cúmulos Acoplados 7.4 Estudio de caso

8	Estado Sólido		
	8.1 Teoría del electrón libre 8.2 Teoría de amarre fuerte 8.3 Teorema de Bloch 8.4 Espacio Recíproco 8.5 Teoría de bandas para sólidos inorgánicos y orgánicos 8.6 Nivel de Fermi 8.7 Densidad de Estados 8.8 Densidad de Carga 8.9 Estudio de caso		
9	Consideraciones prácticas		
	9.1 Conjuntos base 9.2 Niveles de teoría, modelo computacional y precisión química 9.3 Métodos híbridos (QM/MM) 9.4 Simulación de espectros UV, RMN, IR, fluorescencia 9.5 Estudio de caso		
Estrategias didácticas		Evaluación del aprendizaje	
Exposición		Exámenes parciales	X
Trabajo en equipo	X	Examen final	X
Lecturas	X	Trabajos y tareas	X
Trabajo de investigación		Presentación de tema	
Prácticas (taller o laboratorio)		Participación en clase	X
Prácticas de campo		Asistencia	
Aprendizaje por proyectos		Rúbricas	
Aprendizaje basado en problemas		Portafolios	
Casos de enseñanza		Listas de cotejo	
Otras (especificar)		Otras (especificar)	
Línea de investigación: Simulación molecular			
Perfil profesiográfico			
Grado	Maestro en Ciencia e Ingeniería de Materiales		
Experiencia docente	Conocimiento en el área de Ciencia e Ingeniería de Materiales		
Otra característica			
Bibliografía básica:			
1. A.R. Leach. Molecular Modelling. Principles and Applications. 2001			
2. C.J. Cramer. Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models. 2004			
Bibliografía complementaria:			
1. D. Frenkel, B. Smit. Understanding Molecular Simulation. 2002			
2. M.P. Allen, D.J. Tildesley. Computer Simulation of Liquids. 2000			

