

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

INTRODUCCIÓN AL MODELADO COMPUTACIONAL DE SISTEMAS  
ELECTROQUÍMICOS

1,2, 3, 4

6

Asignatura

Clave

Semestre

Créditos

Plan de Estudios: Maestría:

Doctorado:

**Asignatura:**

Optativa   
Obligatoria   
Obligatoria de elección   
Optativa de elección

**Horas:**

Teóricas   
Prácticas

**Tipo:**

Teórica   
Práctica   
Teórica   
Práctica

**Total (horas):**

Semana   
Semestre

**Modalidad:**

Atención Directa   
Curso   
Curso Avanzado   
Curso Básico   
Curso Introductorio

Curso Complementario   
Práctica Clínica o Comunitaria   
Seminario   
Taller   
A Distancia

**Seriación:**

Obligatoria

Indicativa

Sin Seriación

Objetivo general del Curso:

Introducir principios y modelos computacionales generales de sistemas electroquímicos.

Objetivos específicos del Curso:

Preparar al estudiante para el manejo teórico computacional de temas de electrostática, termodinámica, cinética de reacciones, transporte de masa y circuitos equivalentes aplicados a sistemas electroquímicos.

**Temario**

UNIDAD NÚM.	NOMBRE	HORAS	
		TEÓRICAS	PRÁCTICAS
1	<p align="center"><b>Electrostática</b></p> 1.1 Principios fundamentales 1.2 Campo Eléctrico 1.3 Ley de Gauss 1.4 Potencial Eléctrico 1.5 Clasificación Electroestática de Materiales 1.6 Electroestática Básica en Dieléctricos 1.7 Condiciones de Frontera para Ecuaciones Electroestáticas 1.8 Esfuerzo de Maxwell para Dieléctricos Lineales	6	0
2	<p align="center"><b>Doble Capa Eléctrica</b></p> 2.1 Doble Capa en Interfases Cargadas 2.2 Potencial para una Doble Capa Plana 2.3 Potencial para una Doble Capa Curva 2.4 Interacción Electroestática entre Dos Superficies Planas 2.5 Interacción Electroestática entre Superficies Curvas 2.6 Modelos de Potencial de Superficie 2.7 Potencial Zeta	6	0
3	<p align="center"><b>Introducción al Método del Elemento Finito</b></p> 3.1 Sistemas Discretos 3.2 Ensamblaje 3.3 Condiciones de Frontera	3	0
4	<p align="center"><b>FlexPDE</b></p> 4.1 Aprendizaje del programa en la versión libre (estudiantil) 4.2 Modelado del Potencial Eléctrico a través de una Doble Capa Eléctrica Plana 4.3 Modelado del Potencial Eléctrico a través de una Doble Capa Eléctrica Curva	3	0
5	<p align="center"><b>Potenciales y Termodinámica de Celdas</b></p> 5.1 Reversibilidad y Energía Libre de Gibbs 5.2 Medias Reacciones y Potenciales de Reducción 5.3 Fuerza Electromotriz y Concentración 5.4 Potenciales Formales 5.5. Electrodo de Referencia 5.6 Interacciones entre Fases Conductoras 5.4 Potencial Electroquímico 5.5 Conductancia, números de transporte y movilidad	6	0
6	<p align="center"><b>Cinética de Reacciones de Electrodo</b></p> 6.1 Revisión de Cinética Homogénea 6.2 Fundamentos de Reacciones de Electrodo: constante estándar de velocidad, coeficiente de transferencia de carga 6.3 Ecuación Corriente-Sobrepotencial y Formas Aproximadas	6	0
7	<p align="center"><b>Transporte de Masa por Migración y Difusión</b></p>	3	0

	7.1 Difusión 7.2 Migración 7.3 Migración y Difusión Mixtas junto a Electrodo Activo 7.4 Leyes de Difusión de Fick 7.5 Condiciones de Frontera en Problemas Electroquímicos 7.6 Solución de la Ecuación de Difusión		
8	<p style="text-align: center;"><b>Modelado de Reactores Electroquímicos</b></p> 8.1 Distribución de Concentraciones: Difusión 8.2 Distribución de Corriente Primaria 8.3 Distribución de Corriente Secundaria 8.4 Distribución de Corriente Terciaria	9	0
9	<p style="text-align: center;"><b>Técnicas Electroquímicas: Métodos Básicos de Escalón de Potencial</b></p> 9.1 Tipos de Técnicas 9.2 Detección 9.3 Características Corriente-Potencial Aplicables 9.4 Escalón de Potencial bajo Control por Difusión	6	0

**Bibliografía básica:**

1. Bard, A.J. and Faulkner, L.R. **Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications**, John Wiley & Sons, New York, 2<sup>nd</sup>. Ed., 2001.
2. Bird, R.B. *et al.*, **Fenómenos de Transporte**, Reverté Ediciones, México , 1a edición, 5a reimpresión, 1998.
3. Masliyah, J.H. and Bhattacharjee, S. **Electrokinetic and Colloid Transport Phenomena**, John Wiley & Sons, New Jersey, 2006.
4. Zienkiewicz, O.C. and Taylor, R.L. **The Finite Element Method**, 5<sup>th</sup> Edition, Vol 1: The Basis. Butterworth Heinemann, Massachusetts, 2000.

**Bibliografía complementaria:**

**Búsqueda por internet de los temas en cuestión**

**Sugerencias didácticas:**

Exposición oral	<input type="checkbox"/>	Lecturas obligatorias	<input checked="" type="checkbox"/>
Exposición audiovisual	<input checked="" type="checkbox"/>	Trabajos de investigación	<input type="checkbox"/>
Ejercicios dentro de clase	<input checked="" type="checkbox"/>	Prácticas de taller o laboratorio	<input type="checkbox"/>
Ejercicios fuera del aula	<input checked="" type="checkbox"/>	Prácticas de campo	<input type="checkbox"/>
Seminarios	<input checked="" type="checkbox"/>	Otras: (especificar)	<input type="checkbox"/>

**Métodos de evaluación:**

Exámenes parciales	<input checked="" type="checkbox"/>	Participación en clase	<input checked="" type="checkbox"/>
Exámen final escrito	<input type="checkbox"/>	Asistencia	<input checked="" type="checkbox"/>
Tareas y trabajos fuera del aula	<input checked="" type="checkbox"/>	Seminarios	<input type="checkbox"/>
Exposición de seminarios por los alumnos	<input checked="" type="checkbox"/>	Otros: (especificar)	<input type="checkbox"/>

**Línea de Investigación:**

**Electroquímica**

**Perfil profesiográfico:**

**Tener grado de Maestro o Doctor, de preferencia en el campo de Ingeniería Química o Ingeniería Metalúrgica, y experiencia en el trabajo con sistemas electroquímicos.**

