

1985 9 I
(R)

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: Química Inorgánica, Analítica y Química Física

ASIGNATURA: **Termodinámica Estadística**

CARRERA: Licenciatura en Ciencias Químicas ORIENTACION: Qca. Física

DURACION DE LA MATERIA: Cuatrimestral

HORAS DE CLASE: a) Teóricas 4 hs, b) Problemas 4 hs.
(semanales) c) Laboratorio -- d) Seminario -- e) Totales: 8hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Química Física (II)

PROGRAMA

Parte a.: Sistemas de Partículas Independientes.

- 1.- Descripción cuántica de un sistema. Sistemas localizados y no localizados. Paridad de las funciones de onda. Bosones y Fermiones. Definición del conjunto estadístico. Macroestados y microestados. Equiprobabilidad de los microestados. Distribuciones. Distribución más probable. Función de partición. Sistemas diluidos. La distribución de Boltzmann.
- 2.- Entropía y probabilidad. Calor y Trabajo. Temperatura. Conexión con la Termodinámica. Funciones Termodinámicas en términos de la función de partición.
- 3.- Gases ideales monoatómicos. Función de partición translacional. Límite clásico. Separación de la función de partición según los diferentes grados de libertad. Función de partición nuclear y electrónica. Gas ideal di y poliatómico. Vibraciones y rotaciones. Límites clásicos.
- 4.- Sólidos monoatómicos. Teoría de Einstein y Debye. Teoría de los electrones libres en metales. Capacidad calorífica.
- 5.- Descripción clásica. Distribución de Maxwell, Boltzmann. Teoría cinética de los gases. Teorema de equiparación. Aplicaciones.
- 6.- Equilibrio químico ideal. Cálculo de la constante de equilibrio. Utilización de tablas.

Parte b.: Mecánica Estadística. Sistemas de partículas interactuantes.

- 1.- Descripción clásica. Espacio de las fases. Sistemas en equilibrio. Ensamblajes. Constancia de la densidad de puntos. Teorema de Liouville. Formas de la función densidad. Conjunto microcanónico y canónico. Descripción cuántica. Matriz densidad. Conjuntos microcanónico y canónico en la descripción cuántica. Conjunto macrocanónico. Límite clásico. Equivalencia entre ensambles.

Parte c.: Aplicaciones.

- 1.- Estadística de redes. Modelos de Langmuir y B.E.T.. Modelo de Ising unidimensional. Resultados en dos dimensiones transiciones de fase. Métodos aproximados. Bragg-Williams. Cuasi-químico. Relación con ferromagnetismo y paramagnetismo.

Aprobado por Resolución DN 1654/85

./.

RP
WD
Dionisio Pasados

- ./.
- 2.- Gases ideales. Expansión del virial. Interacciones. Actividad. Cálculo de los primeros coeficientes del virial. Teoría de los ramos. Ley de los estados correspondientes.
 - 3.- Teorías del estado líquido. Modelos de celdas. Huecos. Entropía comunal. Funciones de distribución. Reducidas y específicas. Función radial. Ecuación de jerarquía. Clausura. Aproximaciones: Perdus Yevick y HNC. Relación de Ornstein Zernike. Simulación: Monte Carlo y Dinámica molecular.
 - 4.- Soluciones. Modelo de Mac Millan Mayer. Teoría de Hildebrand. Soluciones de electrolitos. Modelo de Debye-Hückel. Introducción a la teoría de Kirkwood.
 - 5.- Transporte: Teoría de colisiones. Ecuación del transporte de Boltzmann. Transporte de materia y de momento. Ecuación de Navier-Stokes. Métodos aproximados. Tiempo de relajación. Aplicaciones. Cálculo de la viscosidad y la conductividad.
 - 6.- Fluctuaciones: El movimiento browniano. Teoría de Langevin. Teoría de Einstein. Teoría de Smoluchowski. Relación de Fokker-Planck. Resultados. Relación entre movilidad y difusión.-

BIBLIOGRAFIA

- 1.- "An Introduction to Statistical Thermodynamics", T.L.Hill; Addison Wesley (1960).
- 2.- "Fundamentals of Statistical and Thermal Physics", F.Reif; Mc Graw-Hill Co., Nueva York (1965).
- 3.- "Statistical Mechanics", N.Davidson; Mc Graw-Hill Co, Nueva York (1962).
- 4.- "Statistical Mechanics", K.Huang, John Wiley Inc., Nueva York (1963)
- 5.- "Introduction to Physical Statistics", John Wiley, Nueva York (1941)
- 6)- "Elements of Therstatistics", D.Ter Haar, Holt, Rinehart and Winston Nueva York (1966).
- 7.- "Statistical Thermodynamics", R.H.Fowler-A.Guggenheim, BCambridge (1939).
- 8.- "Statistical Physics", L.D.Landau, Addison-Wesley, Aguilar (1958).
- 9.- "Statistical Mechanics", J.E.Mayer-M.C.Mayer, Wiley (1940).
- 10.- "Statistical Mechanics", T.L.Hill; Mc Graw-Hill (1956).
- 11.- "Principles of Statistical Mechanics", R.C.Tolman; Oxford (1938)/
- 12.- "

Fecha: Diciembre 1984.-

Firma Profesor:

Dr. D. Posadas

aclaración firma: Dr. D. POSADAS

Firma Director:

Dr. Roberto J. Fernández Prini

Dr. ROBERTO J. FERNANDEZ PRINI

Director Interino

aclaración firma:

Dir. Qc a. Inorg. Anal. y Qc a. Fís.