

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

QI '94
dupl.
7

DEPARTAMENTO: QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y QUIMICA FISICA

CARRERA: Doctorado en Ciencias Químicas

ORIENTACION: -

1er. CUATRIMESTRE: AÑO 1994

CODIGO DE CARRERA: 51

MATERIA: **Termodinámica Estadística**

CODIGO: 5032

PUNTAJE: 5

PLAN DE ESTUDIO: -

CARACTER DE LA MATERIA: -

DURACION: cuatrimestral

HORAS DE CLASE SEMANAL: * Teóricas: 4 hs
* Problemas: 4 hs

TOTAL: 8 hs.

CARGA HORARIA TOTAL: 129

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: -

FORMA DE EVALUACION: 2 parciales y 1 final.

PROGRAMA ANALITICO:

- 1) Descripción microscópica de un sistema de partículas. Microestados y macroestados. Definición de conjunto estadístico (ensembles). Equiprobabilidad de microestados. Hipótesis ergódica. Entropía y su relación con funciones de distribución de probabilidad. Ensembles microcanónicos, canónicos y macrocanónicos. Equivalencia entre ensembles. Formalismo mecánico estadístico. Función de partición. Cálculo de las funciones termodinámicas a partir de la función de partición de un sistema.
- 2) Sistemas de partículas no interactuantes. Estadística de Bose-Einstein y de Fermi-Dirac. Límite clásico. Gases ideales monoatómicos y poliatómicos. Función de partición nuclear y electrónica. Aproximación de Born Oppenheim. Gas de fonones y de fotones. Electrones en metales. Sólidos monoatómicos. Teorías de Einstein y de Debye. Capacidad calorífica. Equilibrio químico ideal. Cálculo de constantes de equilibrio.
- 3) Estadística de redes. Modelos de Langmuir y P.E.T. Modelo de Ising en una y dos dimensiones. Transiciones de fase. Temperatura de Curie. Relación con ferro y paramagnetismo.

APROBADO POR RESOLUCION 09 1269/94

Dr. ENRIQUE A. SAN ROMAN
Director
Depto. QCA, INORG. ANAL, QCA, FIS.

//

- 4) Sistemas de partículas interactuantes. Gases diluidos. Expansión del virial. Desarrollo diagramático. Ley de estados correspondientes. Funciones de distribución radial. Cálculo de propiedades termodinámicas. Potencial de fuerza media. Relación entre potencial químico y trabajo reversible. Funciones de cavidades.
- 5) Teorías del estado líquido. Ecuación de Ornstein-Zernike. Fluido de esferas rígidas. Propiedades termodinámicas. Aproximación de Percus Yevick. Teoría de perturbaciones. Fluidos iónicos. Soluciones de electrolitos. Modelo de Mac Millan-Mayer. Modelo de Debye-Hückel. Aproximación de la cadena hiper-reticulada. Sales fundidas.
- 6) Métodos de simulación computacional en mecánica estadística. Método de Monte Carlo: proceso de Markoff. Método de dinámica molecular. Simulación computacional utilizando distintos ensembles. Estadísticas no boltzmanianas.

BIBLIOGRAFIA

- * An Introduction to Statistical Mechanics; T.L.Hill, Ed. Addison Wesley (1960)
- * Fundamental of Statistical Physics; F.Reif, Ed. McGraw-Hill (1965)
- * Statistical Mechanics; K.Huang, Ed. J.Wiley (1969)
- * Introduction to Modern Statistical Mechanics; D.Chandler, Ed.North-Holland (1987)



Dr. D. Laría

Dr. E. San Román