



QI. 2005
4

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

Buenos Aires, 25 de julio de 2005

Señor Secretario/a Académico/a
de la Facultad de Ciencias
Exactas y Naturales
S/D

Tengo el agrado de dirigirme al señor Secretario Académico a efectos de comunicarle el desarrollo del curso de post-grado y/o doctorado que se dictará en este Departamento durante el ...2do..... cuatrimestre de 2005.

- 1- Denominación del Curso: **Termodinámica Estadística**
- 1a- Carácter del Curso:
(para Doctorado: ampliar conocimientos, actualización, extensión profesional)
- 2- Fecha de iniciación: 16/08/05
- 3- A dictarse en: **Depto. de Qca. Inorgánica, Analítica y Qca. Física**
- 4- Responsable (s): Dr. Daniel Laría
(si no revistan en la Facultad, adjuntar nota solicitando la autorización pertinente, la que comprenderá el dictado del Curso y la firma de las Actas de Examen pertinentes).
(Además agregar curriculum vitae resumido, debidamente firmado por el Director de Departamento o por el interesado).
- 5- Cantidad de horas semanales: 8 hs.
- 5a- Nro. de horas semanales de clases teóricas: 4 hs.
- 5b- Nro. de horas semanales de clases de problemas: ----
- 5c- Nro. de horas semanales de trabajos prácticos: 4 hs. ----
- 6- Condiciones de ingreso: Lic. en Química, Física.
- 7- Nro. de alumnos (mínimo y máximo): 5
- 8- Forma de evaluación: 2 exámenes parciales y un examen final.
- 8a- Certificado de aprobación: SI-NO (tachar lo que no corresponda)
- 9- Puntaje propuesto de acuerdo con el carácter del curso: 5 (cinco)
- 10- Nro. de código: 5032
- 11- Se acompaña despacho de la Sub-Comisión Departamental con Vº.Bº. del Director de Departamento.
- 12- Se propone un arancel de ...20.....módulos, teniendo en cuenta como base el valor de \$(el que rija en ese momento).

SUB COMISIÓN DE DOCTORADO

Dr. MARTÍN NEGRI
DIRECTOR ASISTENTE
D. Q. I. A. Q. E. F. C. E. N

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES



DEPARTAMENTO: QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y QUIMICA FISICA

CARRERA: Doctorado en Ciencias Químicas

ORIENTACION: ---

CUATRIMESTRE: Segundo

AÑO: 2005

CODIGO DE CARRERA: 51

MATERIA: *Termodinámica Estadística*

CODIGO: 5032

PUNTAJE: 5 (cinco)

PLAN DE ESTUDIO: -----

CARÁCTER DE LA MATERIA: -----

DURACIÓN: Cuatrimestral

HORAS DE CLASE SEMANAL:

- Teóricas: 4 horas
- Prácticas: 4 horas

TOTAL: 8 horas

CARGA HORARIA TOTAL: 128 horas

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: -----

FORMA DE EVALUACIÓN: 2 exámenes parciales y 1 examen final.

PROGRAMA ANALÍTICO:

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 B.E.T. Modelo de Ising en una y dos dimensiones. Transiciones de fase. Temperatura de Curie. Relación con ferro y paramagnetismo.
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.

Handwritten signature

DEPTO. QCA. INORGANICA,
ANALITICA Y QCA. FISICA
P.B.E. 19 - U.B.A.

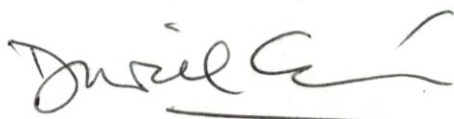
Handwritten signature

1/2
Dr. MARTIN NEGRI
DIRECTOR ADJUNTO
D.Q.I.A.Q.F./FCEN

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.

BIBLIOGRAFÍA

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



Prof. Dr. Daniel Laría

DEPTO. QCA. INORGANICA,
ANALITICA Y QCA. FISICA
RUBEN - U.S.A.



Dr. MARTIN NEGRI
DIRECTOR ADJUNTO
D.Q.I.A.Q.F./FCEN