

Qiu 2013  
5



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

Buenos Aires, 17 de julio de 2013

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 2013.

- 1- Denominación del Curso: **Termodinámica Estadística**
- 1a- Carácter del Curso:  
(para Doctorado: ampliar conocimientos, actualización, extensión profesional)
- 2- Fecha de iniciación: 12/08/13
- 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 V°.B°. 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).

SUBCOMISIÓN DE DOCTORADO

Dr. FERNANDO V. MOLINA  
DIRECTOR ADJUNTO  
DEPTO. QUIMICA INORGANICA  
ANALITICA y QUIMICA FISICA



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

**CARRERA:** Posgrado / Doctorado en Ciencias Químicas

**CUATRIMESTRE:** Segundo

**AÑO:** 2013

**CODIGO DE CARRERA:** 51

**MATERIA:** *Termodinámica Estadística*

**CODIGO:** 5032

**PUNTAJE:** 5 (cinco)

**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.

TE-1/2

Dr. FERNANDO V. MOLINA  
DIRECTOR ADJUNTO  
DEPTO. QUIMICA INORGANICA  
ANALITICA y QUIMICA FISICA



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

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**

**Dr. FERNANDO V. MOLINA**  
DIRECTOR ADJUNTO  
DEPTO. QUIMICA INORGANICA  
ANALITICA y QUIMICA FISICA



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 484.004/2005

Buenos Aires, 26 AGO 2013

VISTO:

la nota presentada por el Dr. Fernando V Molina Director Adjunto del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, mediante la cual eleva la información y el programa del Curso de posgrado **TERMODINAMICA ESTADISTICA**, que será dictado durante el segundo cuatrimestre de 2013 (desde el 12/08/2013) por el Dr. Daniel Laría,

CONSIDERANDO:

lo actuado por la Comisión de Doctorado de esta Facultad el 06/08/2013,  
lo actuado por la Comisión de Investigación, Publicaciones y Postgrado,  
lo actuado por este cuerpo en Sesión Ordinaria realizada en el día de la fecha,  
en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo N° 113° del Estatuto Universitario,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE  
CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
**RESUELVE:**

**Artículo 1°:** Autorizar el dictado del curso de posgrado **TERMODINAMICA ESTADISTICA**, de 128 hs. de duración.

**Artículo 2°:** Aprobar el programa analítico del curso de posgrado **TERMODINAMICA ESTADISTICA** obrante a fs 15 y 16 del expediente de la referencia.

**Artículo 3°:** Ratificar un puntaje de Cinco (5) puntos para la Carrera de Doctorado.

**Artículo 4°:** Aprobar un arancel de 20 módulos. Disponer que los montos recaudados serán utilizados conforme a lo dispuesto por Resolución CD N° 072/03.

**Artículo 5°:** Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, a la Biblioteca de la FCEyN y a la Subsecretaría de Postgrado (con fotocopia del programa incluida fs 15 y 16). Cumplido archívese

Resolución CD N° \_\_\_\_\_  
SP med 14/08/2013

1964

Dra. MARIA ISABEL GASSMANN  
SECRETARIA ACADEMICA ADJUNTA

Dr. JORGE ALIAGA  
DECANO