

Termodinàmica estadística i estats d'agregació

Codi 20602

1er semestre

Professor: A. González

Requisits: Estructura atòmica i enllaç (aprovada), Química física I (aprovada), Química física II (aprovada)

- **Col·lectius mecano-estadístics.**
Introducció. Postulats de la termodinàmica estadística. Concepte de col·lectiu. Col·lectiu canònic. Mètode de la distribució més probable. Funció de partició canònica. Funcions termodinàmiques al col·lectiu canònic. Col·lectiu macrocanònic. Col·lectiu microcanònic. Equació de Boltzmann. Interpretació estadística del Segon i Tercer Principis de la Termodinàmica. Fluctuació i equivalència termodinàmica de col·lectius.
- **Estadístiques de Maxwell-Boltzmann, Fermi-Dirac i Bose-Einstein.**
Sistemes de partícules independents. Partícules discernibles. Estadística de Maxwell-Boltzmann. Partícules indiscernibles. Fermions i Bosons. Estadístiques de Fermi-Dirac i de Bose-Einstein. Deduccions de les fórmules fonamentals a partir del Col·lectiu Macrocanònic. Límit clàssic de les estadístiques quàntiques. Estadística de Maxwell-Boltzmann corregida.
- **Aplicacions de les estadístiques quàntiques.**
Gas Ideal de Fermi-Dirac. Electrons dins un metall. Energia de Fermi. Gas ideal de Bose-Einstein. Condensació de l'Heli. Gas de fotons Llei de Planck. Llei de Stefan-Boltzmann.
- **Mecànica estadística clàssica.**
Introducció. Coordenades i moments generalitzats. Espai fàsic. Funció Hamiltoniana clàssica. Límit clàssic de l'expressió mecano-quàntica de la funció de partició Canònica. Principi d'equipartició de l'energia.
- **Gas ideal.**
Aplicabilitat de l'estadística de Maxwell-Boltzmann corregida. Factorització de la funció d'ona molecular. Funció de partició traslacional. Longitud d'ona tèrmica de de Broglie. Funció de partició electrònica. Funció de partició nuclear. Funció de partició vibracional. Funció de partició rotacional. Funció de partició nuclear-rotacional de les molècules diatòmiques homonuclears. Orto i para-hidrogen. Càlcul de les funcions termodinàmiques.
- **Equilibri químic.**
Mescla de gasos ideals. Formulació estadística de la constant d'equilibri. Efecte del canvi d'origen d'energies. Exemples de càlcul de constants d'equilibri.