

TERMODINÀMICA ESTADÍSTICA I ESTATS D'AGREGACIÓ

Lliçó 1. 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.

Lliçó 2. Estadístiques de Maxwell-Boltzmann, Fermi-Dirac i Bose-Einstein

Sistemes de partícules independents.- Partícules discernibles. Estadística de Maxwell-Boltzmann.- Partícules indiscernibles. Fermions i Bossons.- 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.

Lliçó 3. 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.

Lliçó 4. 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.

Lliçó 5. Gas ideal

Aplicabilitat de l'estadística de Maxwell-Boltzmann corregida.- Factorització de la funció d'ona molecular.- Funció de partició traslacional.- Llongitud 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 molècules diatòmiques homonuclears. Orto i para-hidrogen.- Càlcul de funcions termodinàmiques.

Lliçó 6. 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.

Lliçó 7. Gasos reals

Desviacions del comportament ideal.- Equació de van der Waals.- Equació d'estat del virial a partir del Col·lectiu Macrocanònic.- Coeficients del virial en el límit clàssic.- Aproximació dels potencials de par.- Segon coeficient del virial.

Lliçó 8. Cristalls

Introducció.- Tipus de cristalls.- Energia de cohesió d'un cristall. Constant de Madelung.- Capacitat calorífica dels sòlids.- Espectre vibracional d'un cristall monoatòmic.- Model d'Einstein.- Model de Debye.- Comparació amb els valors experimentals.

Lliçó 9. Estat líquid

Estructura dels líquids.- Teoria de les funcions de distribució.- Funcions de correlació.- Funció de distribució radial.- Expressió de l'energia i de la pressió en termes de la funció de distribució radial.- Funció de distribució radial a densitat baixa.- Potencial de força mitjana.

Lliçó 10. Mètodes de simulació en líquids

Mètodes de simulació.- Expansió de l'energia en sèrie de n-cossos. Potencial de par i correccions de n-cossos.- Condicions periòdiques de contorn.- Truncament de les interaccions.- Mètode de Monte-Carlo.- Algorisme de Metrópolis. Cadenes de Markov.- Anàlisi de resultats.- Dinàmica Molecular.

BIBLIOGRAFIA

- 1.- D.A. Mc QUARRIE "Statistical Mechanics", University Science Books, Mill Valley, California, 1983.
- 2.- T.L. HILL "Introduction to Statistical Thermodynamics", Dover, New York, 1986. (Versió castellana de la 1ª Edició: Paraninfo, Madrid 1970).
- 3.- M. DIAZ-PEÑA "Termodinámica Estadística", Alhambra, Madrid, 1979.
- 4.- IRA N. LEVINE "Physical Chemistry", Mc Graw-Hill, New York, 1988. (Versió castellana de la 3ª Edició: Mc Graw-Hill/Interamericana de España, S.A. Madrid, 1991).
- 5.- R.S. BERRY, S.A. RICE, J. ROSS, "Physical Chemistry" (Part 2), Wiley, New York, 1980.
- 6.- D. CHANDLER "Introduction to Modern Statistical Mechanics", Oxford University Press, New York, 1987.