



Universitat Autònoma de Barcelona

TITULACIÓ: Química

NOM DE L'ASSIGNATURA: 20602 Termodinàmica estadística i estats d'agregació

CURS: 2002/2003

CRÈDITS: 6

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

1. Introducció.

Aproximació macroscòpica i microscòpica a l'estudi de la matèria. Relació entre el món quàntic i les propietats termodinàmiques dels sistemes. Teoria cinètica dels gasos. Visió històrica.

2. Lleis de distribució de població.

Sistemes de partícules independents. Partícules discernibles. Estadística de Maxwell-Boltzmann. Partícules indiscernibles. Fermions i Bosons. Estadístiques de Fermi-Dirac i Bose-Einstein. Funció de partició molecular. Relació entre les lleis de distribució de població i la Termodinàmica: energia interna i entropia.

3. Col·lectius mecano-estadístics.

Postulats de la Termodinàmica Estadística. Concepte de Col·lectiu. Col·lectiu canònic. Funció de partició canònica. Funcions termodinàmiques del Col·lectiu Canònic. Concepte d'entropia i temperatura al Col·lectiu Canònic. Col·lectiu Microcanònic. Equació de Boltzmann. Interpretació estadística del segon i tercer principis de la Termodinàmica. Altres col·lectius. Fluctuacions i equivalència termodinàmica de col·lectius.

4. Determinació de funcions de partició

Funció de partició canònica per a sistemes de partícules independents. Partícules localitzades i partícules deslocalitzades. Aplicabilitat de l'estadística de Maxwell-Boltzmann corregida. Gasos ideals. Factorització de la funció de partició molecular. Funció de partició translacional. Funció de partició electrònica. Funció de partició nuclear. Funció de partició vibracional. Funció de partició rotacional. Càlcul de funcions termodinàmiques.

5. Equilibri químic.

Mescla de gasos ideals. Formulació estadística de la constant d'equilibri. Efecte del canvi d'origen d'energies. Funcions termodinàmiques d'equilibri. Comparació amb dades experimentals.

6. Capacitats calorífiques.

Capacitats calorífiques dels gasos ideals. Capacitats calorífiques dels sòlids monoatòmics. Utilització de les capacitats calorífiques per a la determinació d'entropies Comparació entre resultats experimentals i estadístics de l'entropia. Entropia residual. Rotació interna.

7. Fluids.

Gasos reals. Equació d'estat del Virial. Aproximació dels potencials de par. Segon coeficient del Virial. Estructura dels líquids. Funció de distribució radial. Potencial de força mitjana. Mètodes de simulació en líquids. Càlcul d'increments d'energia lliure.

8. Polímers i biopolímers.

Configuració i conformació en una macromolècula. Càlcul de la llargada d'un polímer. Model "random-walk chain". Model cooperatiu per a la transició α -hèlix \leftrightarrow "random coil" d'una biomolècula.