

Llicenciatura de química

TERMODINÀMICA ESTADÍSTICALliçó 1. Introducció

Aproximació macroscòpica i microscòpica a l'estudi de la matèria. Què és la Termodinàmica Estadística? Exemple: Teoria cinètica dels gasos. Visió històrica.

Lliçó 2. Lleis de distribució de població

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

Lliçó 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.

Lliçó 4. Funció de partició de sistemes de partícules independents

Funció de partició canònica per a sistemes de partícules independents. Partícules localitzades i partícules deslocalitzades. Aplicabilitat de l'estadística de Maxwell-Boltzmann corregida: Límit clàssic. Factorització de la funció de partició molecular.

Lliçó 5. Gasos ideals

Funció de partició translacional. Funció de partició electrònica. Funció de partició nuclear. Càlcul de funcions termodinàmiques dels gasos ideals monoatòmics. Funció de partició vibracional. Funció de partició rotacional. Càlcul de funcions termodinàmiques dels gasos ideals diatòmics i poliatòmics. Comparació entre resultats experimentals i estadístics de les diferents magnituds termodinàmiques.

Lliçó 6. Equilibri químic

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

Lliçó 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.

BIBLIOGRAFIA

1.- D.A. Mc QUARRIE "Statistical Thermodynamics", University Science Books, Mill Valley, California, 1985; "Statistical Mechanics", Harper and Row, New York, 1976.

2.- T.L. HILL "Introduction to Statistical Thermodynamics", Dover, New York, 1986.

- 3.- M. DIAZ-PEÑA "Termodinámica Estadística", Alhambra, Madrid, 1979.
- 4.- R.P.H.GASSER and W.G.RICHARDS "An Introduction to Statistical Thermodynamics", World Scientific Publishing Co., Singapore, 1995.
- 5.- ARIEH BEN-NAIM "Statistical Thermodynamics for Chemists and Biochemists", Plenum Publishing Corporation, New York, 1992.
- 6.- M.C. GUPTA "Statistical Thermodynamics", John Wiley and Sons, New York, 1991.
- 7.- A. H. CARTER "Classical and Statistical Thermodynamics", Prentice-Hall, New Jersey, 2001.
- 8.- I. N. LEVINE "Physical Chemistry", McGraw-Hill, New York, 2002.
- 9.- P. W. ATKINS "Physical Chemistry", Oxford University Press, Oxford, 2002.

Professora:

- Àngels Gonzàlez. Despatx: C7/135; *angels@klignon.uab.es*