

Termodinámica Estadística/ Química 2004

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLAN

LICENCIATURA EN: QUÍMICA.

NOMBRE DE LA ASIGNATURA: TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA.

ÓRGANO INTERNO QUE COORDINA EL PROGRAMA DE LA ASIGNATURA:

DEPARTAMENTO DE: CIENCIAS QUÍMICAS.

SECCIÓN DE: FISICOQUÍMICA.

CICLO AL QUE PERTENECE: PROFESIONAL.

REQUISITO DE SERIACIÓN: FISICOQUÍMICA V.

CARÁCTER DE LA ASIGNATURA: OPTATIVA.

TIPO DE ASIGNATURA: TEÓRICA.

MODALIDAD: CURSO.

SEMESTRE: 7°, 8°, 9°.

NÚMERO DE HORAS /SEMANA/ SEMESTRE:

TEORÍA:

3

PRÁCTICA:

N° DE CRÉDITOS:

6

CLAVE

0008

OBJETIVOS GENERALES DE LA ASIGNATURA:

Destacar la importancia del estudio de la Termodinámica Estadística, como base de estudios cualitativos y cuantitativos, en sistemas de interés para la Química y disciplinas afines.

Interpretar y predecir las propiedades macroscópicas de sistemas formados por muchas partículas (gases, líquidos y sólidos) en términos de las propiedades de las partículas que los componen (átomos, moléculas e iones).

Mostrar el carácter predictivo de la termodinámica estadística aplicada al cálculo de las propiedades termodinámicas y de transporte.

UNIDAD 1. INTRODUCCION Y ELEMENTOS FUNDAMENTALES.

Número de horas de teoría: 9.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Revisar conceptos físicos y matemáticos importantes para el desarrollo del curso y la utilización del método mecánico estadístico.

Relacionar aspectos básicos de Mecánica Clásica, Mecánica Cuántica y Termodinámica Clásica con los niveles de estructura de la materia que se estudian.

1 Posición de la Termodinámica Estadística en relación con la Mecánica Clásica, Mecánica Cuántica y Termodinámica Clásica

1.2. Matemáticas

1.2.1. Problemas combinatoriales

1.2.2. Probabilidad

1.2.2. Aproximación de Stirling

1.2.3. Método de los multiplicadores indeterminados de Lagrange.

1.2.4. Distribuciones y la distribución más probable.

1.3. Mecánica Clásica.

1.3.1. Mecánica de Hamilton

1.3.2. Ecuaciones del Movimiento Hamiltonianas.

1.3.3. Su aplicación al oscilador armónico.

1.4. Mecánica Cuántica

1.4.1. Principios básicos de la Mecánica Cuántica

1.4.2 La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

1.4.3. Su aplicación al oscilador armónico.

1.5. Termodinámica Clásica.

1.5.1 Primera ley de la termodinámica.

1.5.2 Segunda ley de la termodinámica.

1.5.3 Tercera ley de la termodinámica.

1.5.4. Los Potenciales termodinámicos y la dirección de los procesos.

1.5.4.1. Transformaciones de Legendre

1.5.4.2. Relaciones de Maxwell.

1.5.5. El Potencial Químico y la Ecuación de Gibbs - Duhem

1.5.5.1. Criterio de equilibrio

UNIDAD 2. EL MODELO DEL GAS IDEAL MONOATÓMICO.

Número de horas de teoría: 6.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Derivar el concepto de función de partición utilizando el modelo del gas ideal monoatómico.

2.1 El gas ideal monoatómico.

- 2.2 Funciones termodinámicas
- 2.3 La función de partición canónica

UNIDAD 3. LA DISTRIBUCIÓN DE MAXWELL - BOLTZMANN.

Número de horas de teoría: 6.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Comprender la importancia de la distribución estadística de Maxwell - Boltzmann en la comprensión de las bases de la Teoría Cinético Molecular de los gases y la comprensión de algunas propiedades macroscópicas como la temperatura y la presión.

Introducir el principio de equiparación de la energía.

- 3.1 Distribución de velocidades.
- 3.2. Distribución de celeridades.
- 3.3. Distribución barométrica.
- 3.4. El principio de equiparación de la energía.

UNIDAD 4. ESTADÍSTICAS CUÁNTICAS

Número de horas de teoría: 9

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Establecer las ideas básicas que caracterizan a las estadísticas cuánticas.

Explicar el comportamiento de sistemas que obedecen las Estadística de Bose Einstein y Fermi - Dirac.

- 4.1 La indistinguibilidad de las partículas cuánticas.
- 4.2 Estadística de Bose - Einstein.
 - 4.2.1 Condensación de Bose.
 - 4.2.2 Aplicaciones.
 - 4.2.2.1 La radiación del cuerpo negro.
 - 4.2.2.2 Propiedades del He4 (superfluidez).
- 4.3. Estadística de Fermi - Dirac.
 - 4.3.1 Funciones termodinámicas de un gas de fermiones
 - 4.3.2 Aplicaciones.
 - 4.3.2.1 Enlace Metálico.
 - 4.3.2.2 Efecto Fotoeléctrico.

UNIDAD 5. SISTEMAS FORMADOS POR PARTICULAS INDEPENDIENTES CON ESTRUCTURA INTERNA.

Número de horas de teoría: 12.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Comprender la metodología para evaluar las contribuciones rotacionales, vibracionales y electrónicas a las propiedades termodinámicas para un gas diatómico y su extensión al gas poliatómico.

Utilizar las ecuaciones derivadas para evaluar propiedades termodinámicas ó estructurales de algunos gases diatómicos y poliatómicos y comparar los resultados con los valores experimentales reportados.

- 5.1 Consideraciones iniciales.
- 5.2 Gases Diatómicos.
- 5.3 Gases Poliatómicos.
- 5.4 Aplicaciones.

UNIDAD 6. TEMAS SELECTOS.

Número de horas de teoría: 6.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Realizar una actividad independiente orientada y supervisada por el profesor, sobre algún aspecto de las temáticas que se presentan, que lo lleve a profundizar en el método de la Termodinámica Estadística.

Exponer sus resultados en un seminario.

6.1 Sistemas formados por Partículas Interactuantes.

6.2 Sólidos Cristalinos. Espectro de frecuencias de un cristal. Modelos. Aplicaciones.

6.3 Propiedades Eléctricas y Magnéticas de la materia.

6.4 Teoría de Líquidos Simples.

6.5 Teoría de Fluctuaciones.

METODOLOGIA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

- Exposición oral, uso de apoyos didácticos como: proyectores de acetatos, diapositivas.
- Actividades de taller para la resolución de problemas de aplicación del método mecánico estadístico a situaciones concretas.
- Utilización del software especializado para realizar cálculos y gráficas.

PROPUESTA DE EVALUACIÓN.

Se sugieren dos exámenes parciales, complementados con una evaluación de la participación activa del estudiante en las actividades de taller, la entrega de tareas, resolución de series de problemas, y asistencia a clase. La evaluación de la última unidad puede estar determinada por su participación en el seminario y ser considerada como una evaluación parcial más.

PERFIL PROFESIOGRAFICO DEL DOCENTE.

Profesional de la Química con experiencia en Fisicoquímica o estudios de especialidad, maestría o doctorado en el área de Fisicoquímica.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA.

1. Bowler, R. Y M. Sánchez. *Introductory statistical thermodynamics*, Oxford University Press, New York, 1999.
2. Goodisman, J. *Statistical Mechanics for Chemists*, Wiley Interscience, New York, 1997.
3. Mac Quarrie, D.A. *Statistical Thermodynamics*, University Science Books, Herndon, USA, 1997.
4. Mattis, D.C. *Statistical Thermodynamics made simple*, World Sci. Publ, USA, 2003.
5. Widom, B. *Statistical Mechanics: A concise introduction for Chemists*, Cambridge University Press, London, 2002.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

1. García-Colín Scherer, L. *Termodinámica estadística*, UAM-Iztapalapa, México, 1995.
2. Greiner, W. *Thermodynamics and statistical mechanics*, Springer Verlag, New York, 2000
3. Seddon, J. *Thermodynamics and statistical mechanics*, John Wiley and Sons, New York, 2000.
4. Sturge, M.D. *Statistical and thermal physics: Fundamental and applications*, A. K. Peters Ltd. USA, 2003.